

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: B 2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: Informatika a logistika

**Stanovení vlivu zvýšení počtu materiálů v modelu úložiště radioaktivního
odpadu řešeného pomocí softwaru Flow123D.**

**Determination of the influence of increasing in number of the materials in
the model of the nuclear waste dump solved by Flow123D software.**

Bakalářská práce

Autor: **Martin Pelák**

Vedoucí práce: Ing. Josef Chudoba, Ph.D.

Datum odevzdání: 20.5.2011

Prohlášení

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Poděkování

Chtěl bych poděkovat všem, kteří mi pomáhali s tvorbou bakalářské práce. V první řadě bych chtěl poděkovat vedoucímu této bakalářské práce Ing. Josefu Chudobovi, Ph.D. za jeho čas, poskytnuté rady a materiály.

Tato bakalářská práce byla vytvořena s finanční podporou projektu Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy České republiky – výzkumné centrum Pokročilé sanační technologie a procesy, číslo projektu 1M0554.

Anotace

Cílem této bakalářské práce bylo stanovení vlivu zvýšení počtu materiálů v modelu úložiště radioaktivního odpadu řešeného pomocí softwaru Flow123D. Zvýšením počtu materiálů se zajistí geologická heterogenita oblasti. Software Flow123D je určen pro modelování proudění podzemních vod a transportu kontaminantu v geologické oblasti. V úloze je řešen matematický model hlubinného úložiště v hypotetické oblasti Melechov.

Bakalářská práce uvádí problematiku nutnosti ukládání radioaktivních odpadů, obsahuje popis oblasti Melechov a programu Flow123D.

Zvýšení počtu materiálů bylo dosaženo úpravou datových souborů obsahujících popis modelu melechovského masivu. K tomuto účelu byly naprogramovány dva programy. V bakalářské práci je obsažen jejich detailní popis.

Pro vytvoření citlivostní analýzy byl vygenerován soubor sta úloh se zvýšeným počtem materiálů. K jejich vypočtení byl využit univerzitní cluster Hydra. Ke zpracování výstupních souborů bylo částečně využito již vytvořených programů a také bylo zapotřebí vytvořit program nový.

V závěru práce jsou obsaženy pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky a porovnání rychlosti výpočtu původního modelu a modelu s navýšeným počtem materiálů.

Klíčová slova

hlubinné úložiště

radioaktivní odpad

Flow 123D

počet materiálů

Annotation

The main aim of this Bachelor's thesis was to increase number of material types in a model of nuclear waste storage and determine influence of increasing in number of material types. The model is solved by software Flow123D. The increasing in number of material types provides heterogeneity of the area. Flow123D is software for simulation of water flow, solute transport and sorption in a heterogeneous porous and fractured medium. In the assignment, there will be solved a mathematical model of the underground nuclear waste storage situated in a hypothetical area Melechov.

The Bachelor's theses states issues of the necessity of storing radioactive waste. It contains description of Melechov area and description of Flow123D.

The increase in number of materials was achieved by modifying data files that contain a description of Melechov area. Two programs were created to do so. There is a detailed description of those programs stated in this Bachelor's thesis.

For the purpose of creating a sensitivity analysis was generated a set of one hundred tasks with increased amount of materials. University cluster Hydra was used to compute the tasks. Output files were processed by already existing program and two newly created programs.

In the end of the theses, there are probability graphs of concentration of radioactive substance and comparison of computing time between models with and without increased number of materials.

Key words

underground nuclear waste storage

nuclear waste

Flow 123D

number of materials

Úvod.....	9
1 Popis programu Flow 123D	11
1.1 Soubory se vstupními daty	11
1.1.1 Struktura konfiguračního souboru	12
1.1.2 Struktura vstupního souboru sítě – *.msh	13
1.1.3 Struktura vstupního souboru materiálů – *.mtr.....	14
2 Oblast melechovského masivu	15
2.1 Fyzikální vlastnosti prostředí.....	17
2.2 Změny ve vstupních souborech před a po navýšení materiálů	19
2.2.1 Datový soubor s definicí materiálů (*.mtr)	19
2.2.2 Datový soubor s definicí sítě (*.msh).....	21
3 Prostředí pro vývoj programů	22
3.1 Program pro zvýšení počtu materiálů v modelu – Flow parser	23
3.1.1 Změny v datových souborech před a po navýšení materiálů programem.....	23
3.1.2 Manuál k programu Flow parser	25
3.2 Program pro zajištění heterogenity modelu – Generate random files	26
3.2.1 Soubor materiálů	27
3.2.2 Manuál k programu Generate random files.....	27
4 Výpočetní jednotka, cluster Hydra	29
4.1 Komunikace s výpočetním clusterem.....	29
4.2 Nahrání souborů na výpočetní cluster	31
5 Příprava dat pro výpočet transportu v heterogenním prostředí	32
5.1 Dávkový soubor flow.sh pro výpočet úlohy transportu kontaminantů	33
5.2 Hromadné předání výpočtů plánovači úloh.....	34
6 Zpracování vypočtených dat	36
6.1 Výběr povrchových elementů.....	36
6.2 Uložení koncentrací elementů v čase z více úloh.....	37

6.3	Přetřídění zpracovaných dat	39
7	Pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky	42
7.1	Významné elementy	42
7.2	Vykreslení pravděpodobnostních grafů	43
7.3	Výsledky	44
7.3.1	Výsledky na povrchovém elementu 3873	44
7.3.2	Výsledky na povrchovém elementu 3921	45
7.3.3	Výsledky na povrchovém elementu 3982	46
7.3.4	Výsledky na elementu 19768	47
8	Porovnání rychlosti výpočtů	49
	Závěr	50

Seznam obrázků

Obrázek 1: Podklady pro přípravu matematického modelu pro oblast melechovského masivu.	15
Obrázek 2: Vizualizace připravené geometrie v programu GMSH [6].....	16
Obrázek 3: Výpočetní síť modelu [6].....	17
Obrázek 4: Microsoft Visual Studio 2010 Ultimate s otevřeným projektem „Flow parser“ ...	22
Obrázek 5: Okno programu Flow parser ihned po spuštění	25
Obrázek 6: Okno programu Flow parser při úspěšném zpracování souborů	26
Obrázek 7: Okno programu Generate random files	27
Obrázek 8: Okno programu Generate random files po úspěšném vygenerování souborů	28
Obrázek 9: Hlavní konfigurační dialog programu PuTTY	30
Obrázek 10: Terminálové okno po úspěšném přihlášení	30
Obrázek 11: Okno programu WinSCP po spuštění.....	31
Obrázek 12: Struktura vstupních dat pro výpočet	35
Obrázek 13: Program pro úpravu souborů	37
Obrázek 14: Program na úpravu dat po úspěšném zpracování dat.....	38
Obrázek 15: Program „Distribution function“ v původním stavu po spuštění	40
Obrázek 16: Okno programu Distribution function po zpracování souborů.....	41
Obrázek 17: Spuštěný program Matlab 7.11.0 (R2010b) s vykresleným grafem.....	43

Seznam grafů

Graf 1: Distribuční funkce – material 3873 (SortedFile204.csv).....	44
Graf 2: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3873	44
Graf 3: Distribuční funkce – material 3921 (SortedFile215.csv).....	45
Graf 4: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3921	45
Graf 5: Distribuční funkce – material 3982 (SortedFile228.csv).....	46
Graf 6: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3982	46
Graf 7: Distribuční funkce – material 19768	47
Graf 8: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 19768.....	47

Úvod

V mnoha odvětvích lidské činnosti, všude na světě, vznikají nejrůznější odpady, včetně radioaktivních. Jedna skupina radioaktivních odpadů vzniká v průmyslu, zemědělství či výzkumu. Ve zdravotnictví se jedná konkrétně o měřicí přístroje, oděvy, látky, papíry, použité injekční stříkačky a zářiče z nemocnic. Tyto odpady jsou souhrnně označovány jako instucionální.

Druhou skupinou jsou odpady spojené s provozem jaderné elektrárny. Mimo vyhořelé jaderné palivo, které tvoří většinu vzniklého odpadu v této oblasti, se jedná o nejrůznější kapaliny, látky a manipulátory, které přišly do styku s radionuklidy.

Odpady z obou skupin představují nebezpečí pro lidský život, a proto se musí zpracovat a bezpečně uložit ještě před tím, než je bude možné znovu využít či ekologicky zlikvidovat. Problém ukládání radioaktivních odpadů je aktuální již od vzniku prvních jaderných elektráren.

Českým geologickým ústavem byl vytipován melechovský masiv jako vhodné prostředí pro testovací lokalitu, kde budou odzkoušeny nové metody a postupy, které budou posléze využity při vyhledávání konečné lokality pro hlubinné úložiště vysoce aktivních odpadů [1, s. 203.]

Na základě geologických dat byl zpracován elektronický 3D model horninového masivu v oblasti Melechov, který je vhodný pro matematicko-fyzikální modelování. Model se snaží co nejvěrněji popsat reálnou oblast. I přesto je značně homogenní.

Cílem bakalářské práce je stanovit vliv zvýšení počtu materiálů v modelu úložiště radioaktivního odpadu řešeného pomocí softwaru Flow123D. Zvýšením počtu materiálů se zajistí geologická heterogenita oblasti.

Samotný model je definován v několika textových souborech. Dosažení zvýšení počtu materiálů bude realizováno úpravou vstupních datových souborů sítě (*.msh) a materiálů (*.mtr).

Pro potřeby citlivostní analýzy bude třeba vygenerovat sadu úloh. Jednotlivé modely budou obsahovat stejný počet materiálů, ale vlastnosti daných materiálů budou odlišné. Každá úloha sady pak bude reprezentovat jednu teoreticky možnou podobu skutečného masivu. Pro účely zvýšení materiálů a následného generování sítí se změněnými

vlastnosmi typů materiálů budou vytvořeny dva programy. K jejich vytvoření bude použito vývojové prostředí Microsoft Visual Studio a programovacího jazyka C#.

Vygenerované úlohy budou vypočteny pomocí programu Flow123D. Výstupní data budou zpracována dostupnými programy a jedním nově vytvořeným programem. Ze zpracovaných dat pak budou pomocí Matlabu sestaveny pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky na vybraných elementech.

V závěru práce bude porovnávána rychlost výpočtu na dvou úlohách.

1 Popis programu Flow 123D

Flow 123D je software pro simulování proudění vody a modelování transportu rozpuštěných látek. Při modelování transportu kontaminantů je možné uvažovat sorpci v heterogenních horninových masivech. Software je obzvláště vhodný pro simulace podzemních procesů žulových horninových masivů.

Program je implementován v jazyce Borland C++ a využívá knihovnu PETSc pro vědecké aplikace. Flow123D je distribuovaný pod licencí GNU GPL verze tři. Na stránkách projektu <https://dev.nti.tul.cz/trac/flow123d> je k dispozici ke stažení ve verzi pro operační systém Linux nebo Microsoft Windows. Na těchto stránkách je uveden i volně stažitelný manuál.

Program Flow123D je možné konfigurovat pomocí konfiguračního souboru s příponou *.ini. Jedná se o jeden z nejdůležitějších vstupních souborů, kde jsou uvedeny i názvy ostatních vstupních souborů s daty, nutnými k provedení výpočtu, tak i názvy souborů, kam se ukládají výsledky výpočtů.

V rámci bakalářské práce bude řešena úloha, kdy se budou měnit jednotlivé vstupní soubory v programu Flow123D. Následně výstupní soubory budou zpracovány vytvořeným softwarem. Změny budou prováděny ve zvýšení počtu typu materiálů, čímž se popíše heterogenita modelované oblasti. Z tohoto důvodu je důležité tyto soubory, kde dochází ke změnám, detailně popsat.

1.1 Soubory se vstupními daty

Vstupní data nutná pro výpočet jsou programu předávána ve formě textových souborů. Pro přehlednost je doporučeno používat následující přípony:

- *.msh – soubor sítě oblasti masivu,
- *.ngh – soubor vymezení sousedností v síti,
- *.mtr – popis typů hornin a puklin (soubor materiálů),
- *.bcd – soubor okrajových podmínek proudění,
- *.bct – okrajové podmínky proudění pro transport,
- *.tbc – okrajové podmínky transportu,
- *.tic – počáteční podmínky transportu,
- *.fic – počáteční podmínky proudění,
- *.ict – počáteční podmínky koncentrací.

1.1.1 Struktura konfiguračního souboru

Konfigurační soubor programu Flow123D je rozdělen na několik částí: Global, Input, Transport, Constants, Run, Solver, Output.

Název části je ohraničen hranatými závorkami [nazev_casti], konstanty se definují zápisem `jmeno_konstanty = hodnota_konstanty`.

[Global]

- Problem_type* – typ řešeného problému
(0 – různorodé prostředí, 1 – stejnorodé prostředí)
- Description* – krátký popis řešení úlohy
- Stop_time* – časový interval, pro který je úloha řešena
- Save_step* – výstup s transportem bude zapisován pravidelně v zadaném intervalu

[Input]

- Mesh* – jméno souboru definující síť (*.msh)
- Material* – jméno souboru definující materiálové parametry elementů například hydraulické vlastnosti (*.mtr)
- Boundary* – jméno souboru s okrajovými podmínkami proudění (*.bcd)
- Neighbouring* – jméno souboru s vymezením sousedností (*.ngh)

[Transport]

- Concentration* – jméno souboru s počáteční koncentrací (*.ict)
- Transport_BCD* – jméno souboru s okrajovými podmínkami proudění pro transport (*.bct)
- Transport_out* – jméno souboru s okrajovými podmínkami proudění (*.t.pos)

[Input]

- Output_file* – jméno výstupního souboru (*.f.pos)
- Output_file_2* – jméno druhého výstupního souboru (*.f.txt)

Kompletní přehled konfiguračních parametrů je dostupný v dokumentaci [2, s. 4]

1.1.2 Struktura vstupního souboru sítě – *.msh

Je rozdělen do tří sekcí:

- \$MeshFormat – \$EndMeshFormat – definice formátu souboru
- \$Nodes – \$EndNodes – definice uzlů
- \$Elements – \$EndElements – elementy v síti

Následuje úplná struktura souboru s popisem vybraných parametrů.

\$MeshFormat

2.0 *file-type data-size*

\$EndMeshFormat

\$Nodes

number-of-nodes

node-number x-coord y-coord z-coord

...

\$EndNodes

\$Elements

number-of-elements

elm-number elm-type number-of-tags <tags> node-number-list

...

\$EndElements

popis vybraných parametrů:

number-of-nodes – počet uzlů v síti

node-number – číslo (index) n-tého uzlu v síti. Čísla nemusí jít za sebou.

x-coord y-coord z-coord – souřadnice X, Y, Z s plovoucí desetinou čárkou uzlu v síti.

number-of-elements – počet elementů v síti

elm-number – číslo elementu (index) n-tého elementu v síti. Čísla elementů nemusí jít po sobě.

elm-type – definuje geometrický typ n-tého elementu. Typy použité v úloze:

2 – Trojúhelník (3 uzly)

4 – Čtyřstěn (4 uzly)

number-of-tags – počet tagů n-tého elementu.

tag – je integer spojený s n-tým elementem.

node-number-list – je seznam uzlů n-tého elementu (odděleny mezerou, bez čárky).

1.1.3 Struktura vstupního souboru materiálů – *.mtr

Soubor je rozdělen do osmi částí (\$MaterialFormat, \$Materials, \$Storativity, \$Geometry, \$Sorption, \$SorptionFraction, \$DualPorosity, \$Reactions).

Pro přehlednost následuje struktura části souboru s definicí materiálů a popisem parametrů.

```
$Materials
number-of-materials
material-number material-type <material-type-specific-data> [text]
...
$EndMaterials
```

kde

number-of-materials int – počet materiálů definovaných v modelu

material-number int – integer, jedinečné číslo (index) n-tého materiálu

material-type int – typ materiálu. V úloze jsou použity konstanty 21, 31 pro puklinu respektive horninu.

<material-type-specific-data > – formát záleží na typu materiálu. V počítané úloze je to pak hydraulická vodivost v metrech za rok (m/rok).

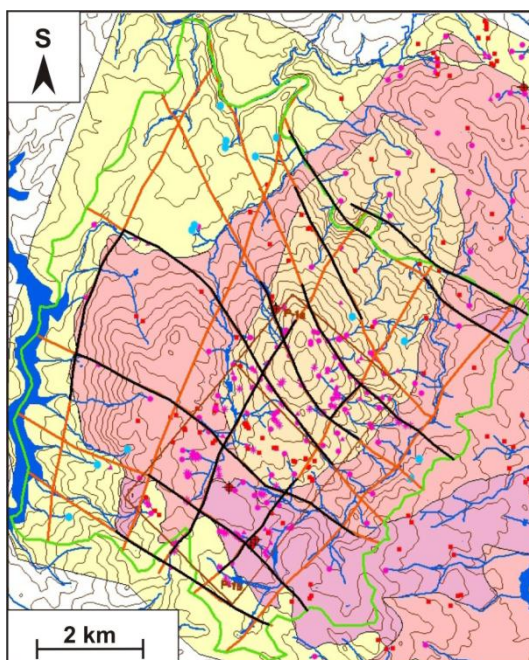
text char[] – popis materiálu, maximálně 256 znaků. Volitelný parametr.

2 Oblast melechovského masivu

Na základě geologických a hydrogeologických výzkumů v melechovské oblasti byl vytvořen matematický model popisující oblast o rozloze 60 km². Byly vymezeny hydrogeologicky významné zlomy a geologická stavba horniny a puklin v závislosti na hloubce.

Pro získání výsledků simulací proudění, které mají co nejvíce odpovídat skutečnosti je nutné, aby vstupní data modelu horninového masivu co nejvěrohodněji popisovala reprezentovaný model. Zvýšení počtu materiálu v masivu má za cíl zlepšit model oblasti melechovského masivu. U nově vygenerovaných materiálů je upravena hydraulická vodivost tak, aby došlo ke zvýšení heterogenity modelu.

Podkladem pro tuto bakalářskou práci byla plně funkční, nakonfigurovaná a prakticky otestovaná úloha, která již byla v minulosti řešena. Její součástí jsou vstupní a konfigurační soubory pro program Flow123D. Ze souboru s daty sítě (*.msh) je zřejmé, že síť melechovského masivu je reprezentována 7174 uzly, které dohromady vytváří 37068 elementů. Každý element je složen z 3-4 uzlů (2D nebo 3D element) a má přiřazen typ materiálu, kterým je tvořen. Datový soubor s materiály (*.mtr) definuje 38 typů materiálů.



Obrázek 1: Podklady pro přípravu matematického modelu pro oblast melechovského masivu. Obrázek je převzat z [4]

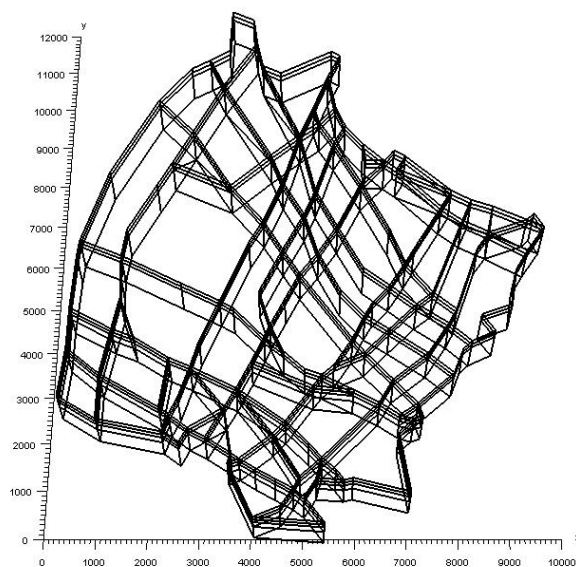
Na obrázku 1 je zobrazená oblast melechovského masivu [4], kde:

- zelená linie – vymezuje simulovanou oblast,
- oranžová linie – představuje referenční síť tektonických zlomů,
- černá linie – reprezentuje tektonické prvky s ověřenou nebo předpokládanou hydrogeologickou funkcí [4]

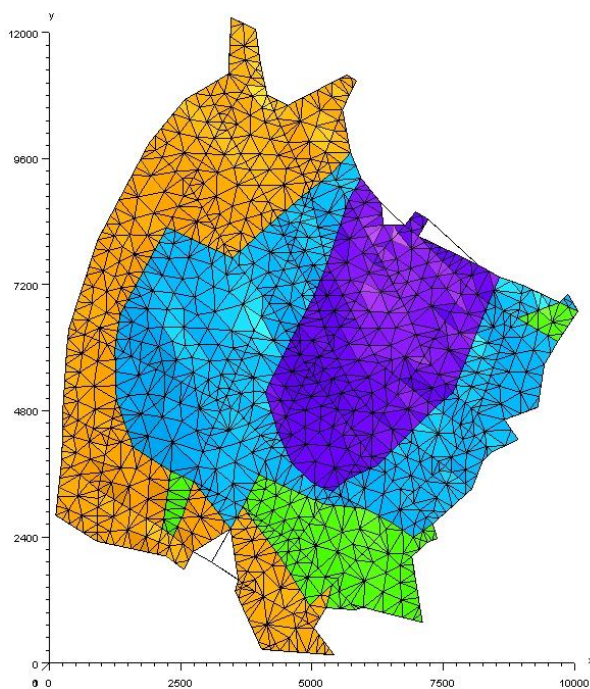
Model je připraven pro saturovanou část horninového masivu do hloubky -600 m n.m. (tj. hloubka modelovaného bloku se pohybuje v rozmezí 1000 – 1300 m). Hydraulické vodivosti hornin jsou zadávány na základě údajů publikovaných ve zprávě [9].

Na vytvořené geometrii byla vygenerována a pro následné výpočty použita síť, která obsahuje jeden horizontální zlom a další vertikální zlomy dle referenční sítě tektonických prvků – viz černé linie na obr. 1. Síť oblasti byla generována s charakteristickou délkou 300 m. Další vstupní údaje výpočetní sítě jsou:

- počet uzlů – 7174,
- počet 2D elementů – 2798,
- počet 3D elementů – 34 270,
- počet všech elementů – 37 068.



Obrázek 2: Vizualizace připravené geometrie v programu GMSH [6]



Obrázek 3: Výpočetní síť modelu [6]

V rámci zprávy [6] byly na síti realizovány testovací výpočty pro ověření jejich použitelnosti a odstranění případných chyb. Ve stejné zprávě jsou publikovány výsledky, prováděné na dané výpočetní síti.

2.1 Fyzikální vlastnosti prostředí

Při vytváření jednotlivých entit pro přiřazení fyzikálních vlastností prostředí – především hydraulické vodivosti – bylo rozlišeno:

- o jakou geologickou strukturu se jedná – porézní masiv, zlomová zóna,
- o jakou horninu se jedná – granit melechovského typu, granit koutského typu, granit typu Lipnice, pararuly.

Dále byly uvažovány rozličné fyzikální vlastnosti prostředí podle hloubkového rozlišení oblasti – hloubka do 75, 150, 400, 600, 800, 800 a více metrů. [1]

Pro simulační výpočty byla připravena referenční sada dat hydraulických vodivostí, které vstupují do modelu v rámci souboru mm.mtr. Každému materiálu horniny (tzn. rozlišitelné podle typu geologické struktury, typu horniny a uvažované hloubce horninové matrice) a pukliny je definováno jednoznačné číselné označení materiálu a dále hydraulická vodivost. Vstupní údaje k jednotlivým typům horniny a puklin jsou

uvedeny v tabulce 1 a 2, kde je uvedena hydraulická vodivost a zároveň číselné označení materiálu. Číselné označení materiálu hornin/puklin je shodné jako číselné označení v souboru mm.mtr.

Tabulka 1: Hydraulické vodivosti jednotlivých typů puklin a hornin [6]

Datová sada hydraulických vodivostí – [m/rok]				
Hornina objemy				
Hloubka do	Melechovský typ	Koutský typ	Lipnický typ	Ruly
75	18,0 – 9117	5,4 – 9112	1,8 – 9107	0,36 – 9100
150	2,88 – 9217	0,86 – 9212	0,288 - 9207	0,057 6 – 9200
400	0,288 – 9317	0,043 – 9312	0,028 8 – 9307	0,005 76 – 9300
600	0,028 8 – 9417	0,008 6 – 9412	0,002 88 – 9407	0,000 36 – 9400
800	0,005 4 – 9517	0,001 53 – 9512	0,000 54 – 9507	0,000 072 – 9500
více než 800 m	0,001 08 – 9617	0,000 324 – 9612	0,000 12 - 9607	0,000 012 – 9600
Pukliny vertikální				
Hloubka do	Bez rozlišení horniny			
75	14,4 – 4100			
150	7,2 – 4200			
400	7,2 – 4300			
600	3,6 – 4400			
800	1,8 – 4500			
více než 800 m	0,72 – 4600			
Pukliny horizontální				
Hloubka	Melechovský typ	Koutský typ	Lipnický typ	Ruly
150	72,0 – 2200	36,0 – 2207	36,0 – 2212	18,0 – 2217

Tabulka 2: Rozevření puklin v melechovském masivu [3]

Datová sada rozevření puklin – [m]				
Pukliny vertikální				
Hloubka do	Bez rozlišení horniny			
75	0,2			
150	0,2			
400	0,1			
600	0,1			
800	0,1			
více než 800 m	0,1			
Pukliny horizontální				
Hloubka	Melechovský typ	Koutský typ	Lipnický typ	Ruly
150	0,1	0,1	0,1	0,1

Jedním z úkolů práce je navýšit počet materiálů v modelu melechovského masivu tak, aby každý element měl přiřazen svůj jedinečný typ materiálu. V této konkrétní úloze to znamená navýšení počtu materiálů z 38 na 37068, což je počet odpovídající skutečnému počtu elementů. Tímto bude popsána heterogenita modelované melechovské oblasti.

Navýšení počtu materiálů bude realizováno změnou obsahu datových souborů sítě *.msh a souboru materiálů *.mtr definujících strukturu a vlastnosti modelu. Tyto soubory jsou popsány v kapitole 2.1.2 a 2.1.3.

2.2 Změny ve vstupních souborech před a po navýšení materiálů

Dále uvedené ukázky ze souborů *.mtr (popis materiálů horniny) a souboru *.msh (popis modelu sítě oblasti) ukazují vybrané části vstupních datových souborů programu Flow123D před navýšením a po požadovaném navýšení počtu materiálů.

2.2.1 Datový soubor s definicí materiálů (*.mtr)

Kompletní struktura vstupního souboru materiálů je popsána v sekci 2.1.3. Následující řádky jsou pro ilustraci ze souboru mm.mtr, který je součástí dodané úlohy. Číslo 38, za uvození sekce *materials*, značí počet definovaných materiálů v oblasti. Následuje deklarace prvních dvou materiálů před navýšením počtu materiálů. Celý soubor *.mtr je součástí příloženého CD.

Použitá konstanta 21 ve druhém sloupci u obou materiálů (2200 a 2207) značí, že elementy tvořeny tímto typem materiálů tvoří pukliny. U horninového masivu se číslo 21 změní na 31. Hydraulická vodivost typu materiálu je uvedena ve třetím sloupci.

```
$Materials
38
2200 21    7200.00
2207 21    3600.00
```

Požadovaný výsledek změny souboru *.mtr po zvýšení počtu materiálů:

```
$Materials
37068
22000001 21    20283
|
22000531 21    13325
22070001 21    271041
|
22070189 21    18750
```

Původní materiál je rozkopírován tolikrát, kolik elementů bylo daným materiálem tvořeno. Za jeho číselné označení je přidáno čtyřmístné číslo (silně zvýrazněno), které označuje pořadové číslo kopie a v kombinaci s původním označením materiálu vytváří jednoznačný identifikátor materiálu. Ze souboru po úpravě vyplývá, že materiálem 2200 bylo tvořeno 531 elementů, protože nejvyšší označení je 2200**0531**.

Původní model masivu je značně homogenní, a proto při přiřazování jedinečného materiálu každému elementu v síti vynásobíme hydraulickou vodivost náhodným číslem z logaritmicko-normálního rozdělení. Tím se dosáhne heterogenita prostředí.

.NET Framework neobsahuje generátor, který by generoval čísla z logaritmicko-normálního rozdělení. Zato ale umožňuje generovat pseudonáhodná čísla z rovnoměrného rozdělení. Bylo tedy využito Box-Mullerovy transformace, která se využívá k transformování pseudonáhodných čísel do čísla z gaussova rozdělení. Převezená čísla byla následně transformována do logaritmicko-normálního rozdělení.

Předpokládejme, že x_1 a x_2 jsou pseudonáhodná čísla. Pak Box-Mullerova transformace má takovýto tvar:

$$y_1 = \sqrt{-2 \times \ln(x_1)} \times \cos(2 \times \pi \times x_2)$$

$$y_2 = \sqrt{-2 \times \ln(x_1)} \times \sin(2 \times \pi \times x_2)$$

2.2.2 Datový soubor s definicí sítě (*.msh)

V souboru *.msh bude měněno u každého elementu číslo materiálu na nově vygenerované. Příklad představuje deklaraci prvních dvou elementů vstupního souboru *.msh před zvýšením počtu materiálů.

Element 0 je tvořen materiálem **2212** a uzly 2129, 277, 150 a obdobně element 1 je tvořen stejným materiálem, popsán uzly 278, 2129 a 277.

\$Elements

37068

0 2 2 **2212** 2212 2129 277 150

1 2 2 **2212** 2212 278 2129 277

Požadovaný výsledek změny souboru *.msh po zvýšení počtů materiálů:

\$Elements

37068

0 2 2 **22120001** 22120001 2129 277 150

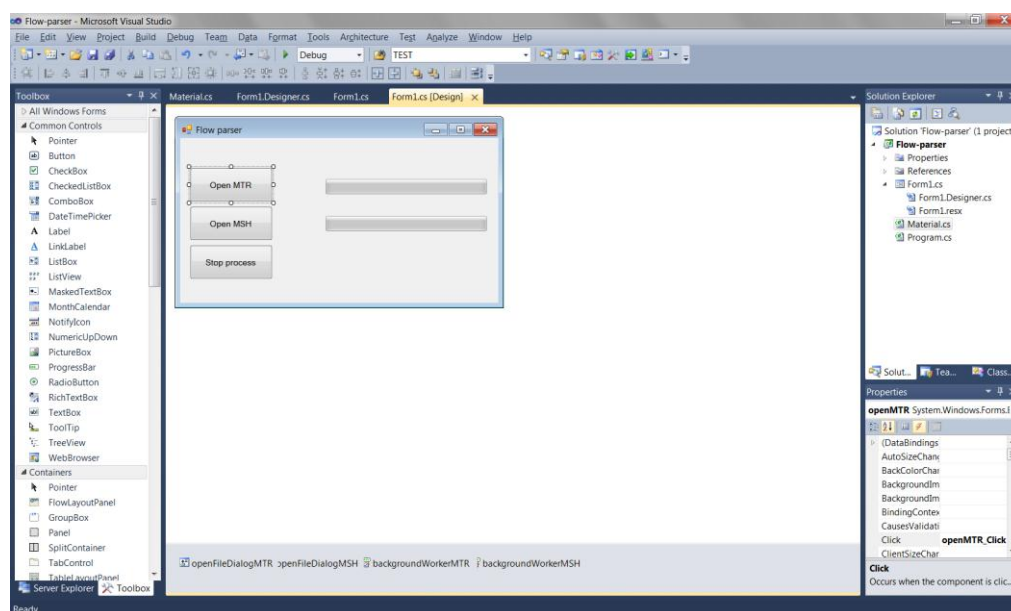
1 2 2 **22120002** 22120002 278 2129 277

Každý element má nyní přiřazen svůj jedinečný materiál. V datovém souboru sítě *.msh je k původnímu materiálu přidáno čtyřmístné číslo určující pořadí výskytu materiálu v rámci souboru. Obdobně jsou očíslovány všechny materiály v souboru sítě (*.msh).

3 Prostředí pro vývoj programů

K zvýšení počtu materiálů v modelu melechovského masivu budou vytvořeny dva programy – „Flow parser” a „Generate random numbers”. První program zvyšujete počet materiálů na skutečný počet elementů tím, že upraví soubory *.msh a *.mtr. Druhý program využije výstupu z programu „Flow parser” a změní hydraulické vodivosti materiálů v souboru *.mtr.

K vývoji aplikací bylo použito vývojové prostředí Microsoft Visual Studio 2010 Ultimate. Jedná se o nejnovější a nejvyšší verzi tohoto integrovaného prostředí. Tento produkt je možné nainstalovat pouze na operační systém Microsoftu, Windows. Na obrázku 1 je možné vidět vývojové prostředí s otevřenou naprogramovanou aplikací „Flow parser”.



Obrázek 4: Microsoft Visual Studio 2010 Ultimate s otevřeným projektem „Flow parser“

Jazyk C# je komplexní moderní, čistě objektově orientovaný programovací jazyk. Vychází z jazyka C/C++, ale v mnohém má blíže k jazyku Java. Aplikace postavené na tomto jazyce vyžadují .NET framework.

Vybrané vlastnosti jazyka

- Podpora vícenásobné implementace rozhraní, ne však vícenásobné dědičnosti
- Automatická správa paměti – Garbage collector
- Zpracování výjimek (exceptions) – zachytávání chybných stavů pomocí klíčových slov `try`, `catch` a volitelně `finally`.
- Podpora správy verzí, atributové programování
- Komponentové programování

3.1 Program pro zvýšení počtu materiálů v modelu – Flow parser

Pro zvýšení počtu materiálů v modelu byl vytvořen nový program s názvem „Flow parser“. Vstupem do programu jsou dva datové soubory zadané uživatelem – vstupní soubor sítě (*.msh) a materiálů (*.mtr) programu Flow 123D. Program tyto soubory načítá a získává kompletní informace o struktuře modelu sítě včetně vlastností všech elementů a materiálů.

Výstupem programu jsou dva nové datové soubory, stejného typu jako načítané soubory, s navýšeným počtem materiálů na skutečný počet elementů. Každý element sítě má tedy přiřazen svůj vlastní jedinečný materiál. Počet typů materiálů odpovídá počtu elementů. Nově vzniklé materiály v souboru *.mtr jsou vygenerovány tak, aby vlastnosti všech elementů, definované typem přiřazeného materiálu, zůstaly nezměněné.

Model s navýšeným počtem materiálů je ve stejné míře homogenní jako model definovaný načítanými soubory. Takto připravená data budou dále zpracována programem „Generate random files“ popsáným dále v této práci.

3.1.1 Změny v datových souborech před a po navýšení materiálů programem

Následuje porovnání vybraných částí datových souborů sítě (*.msh) a materiálů (*.mtr) před navýšením počtu materiálů programem a po navýšení počtu materiálů.

Definice prvních dvou typů materiálů hned ze začátku souboru s definicí materiálů (*.mtr), soubor načítaný programem

```
$Elements
38
2200 21    7200.00
2207 21    3600.00
```

Nově vygenerovaný soubor sítě na základě načtených dat z původního souboru sítě

```
$Elements
37068
22000001 21    7200
      |
22000531 21    7200
22070001 21    3600
      |
22070189 21    3600
```

Počet typů materiálů byl zvýšen na skutečný počet materiálů v modelu. Hydraulické vodivosti zůstaly nezměněny. Tím se výstup liší od požadovaného výsledku definovaného v kapitole 3.1.1.

Na základě tohoto souboru sítě se zvýšeným počtem materiálů je možné následně generovat větší množství souborů sítě s již upravenou hydraulickou vodivostí. K tomu účelu byl vytvořen již zmíněný program „Generate random files“.

Porovnání souborů *.msh před a po běhu programu „Flow parser“.

Výpis prvních dvou elementů z původního souboru sítě

```
$Elements
37068
  0  2  2  2212  2212  2129  277  150
  1  2  2  2212  2212   278  2129  277
```

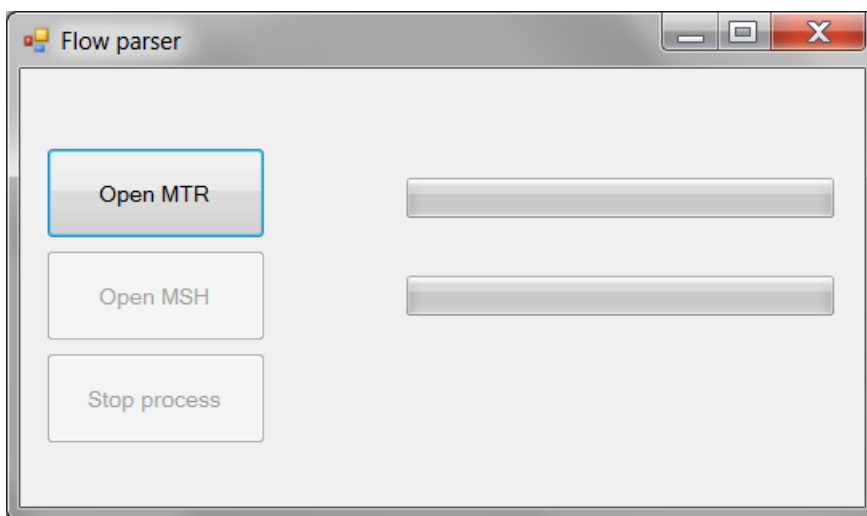
Výsledný soubor sítě uložený programem po zpracování předaných informací o modelu sítě.

```
$Elements
37068
  0  2  2  22120001 22120001  2129  277  150
  1  2  2  22120002 22120002  278  2129  277
```

Z příkladu je patrné, že datový soubor s definicí sítě odpovídá požadavkům na zvýšení počtu materiálů.

3.1.2 Manuál k programu Flow parser

Po spuštění programu se otevře hlavní okno se třemi tlačítky a dvěma ukazateli průběhu – obrázek 5.



Obrázek 5: Okno programu Flow parser ihned po spuštění

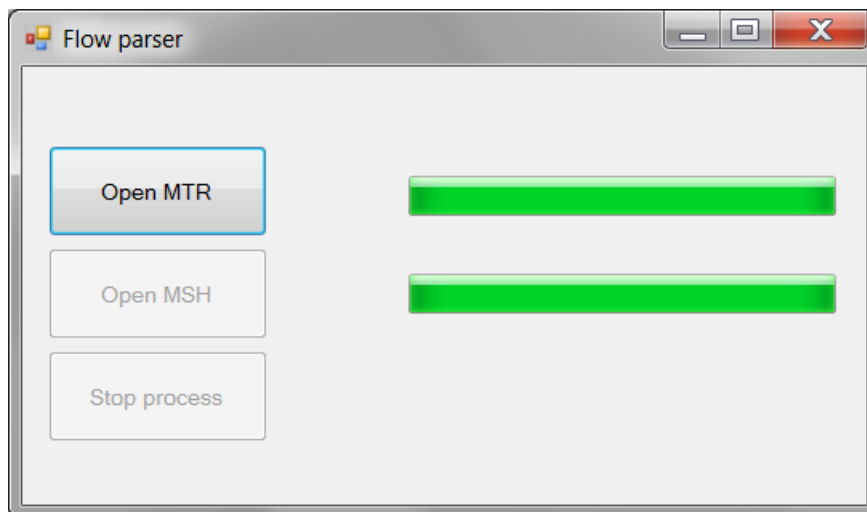
V počáteční fázi po spuštění programu nemá uživatel jinou možnost, než kliknout na jediné aktivní tlačítko „Open MTR“. To otevírá dialogové okno s možností výběru souborů s příponou *.mtr. Ihned po potvrzení výběru souboru začíná jeho načítání, program získává informace o typech materiálů a jejich vlastnostech v tomto souboru definovaných. Průběh zpracování tohoto souboru je indikován ukazatelem zpracování umístěným hned vedle tlačítka.

Jestliže zpracování dopadlo úspěšně, tlačítko „Open MTR“ zašedne a tlačítko „Open MSH“ bude aktivní. Uživateli je po kliknutí na druhé tlačítko umožněno vybrat soubor s příponou *.msh. Obdobně jako v předchozím případě, po jeho výběru začíná zpracování programem, průběh zpracování je indikován ukazatelem zpracování.

Třetí tlačítko „Stop process“ je aktivní při zpracovávání některého ze souborů a v případě, že by program pracoval nestandardně, pak je možné celý proces kliknutím na toto tlačítko ukončit.

Po úspěšném načtení souborů jsou vygenerovány dva soubory – datový soubor sítě a materiálů. Ty přebírají názvy souborů poskytnutých uživatelem jako vstup do programu. Původní soubory jsou doplněny o příponu *.original.

Obrázek 6 ukazuje stav programu po úspěšném zpracování a vygenerování datových souborů. Celá tato operace trvala na osobním přenosném počítači méně než 5s.



Obrázek 6: Okno program Flow parser při úspěšném zpracování souborů

Popis vybraných součástí kódu tvořící tento program je uveden jako příloha B.

3.2 Program pro zajištění heterogenity modelu – Generate random files

Pro zvýšení heterogenity modelu byl vytvořen program „Generate random files“. Software umožňuje změnit hydraulické vodivosti jednotlivých typů materiálů a tím vytvořit z homogenního model heterogenní. Pro možné analýzy rizik pomocí metody Monte Carlo je možné vygenerovat sadu těchto vstupních souborů.

Vstupem do programu je datový soubor materiálů, který je vygenerován programem „Flow Parser“.

Program „Generate random files“ načítá datový soubor materiálů vybraný uživatelem a soustředí se na jedinou vlastnost načtených materiálů – hydraulickou vodivost. Původní hydraulickou vodivost změní vynásobením náhodného čísla z logaritnicko-normálního rozdělení. V práci [9] je uvedeno, že toto rozdělení popisuje právě hydraulickou vodivost hornin. Pro generování náhodných čísel z normovaného normálního rozdělení je využito Box-Mullerovy transformace, která je následně přetransformována do logaritnicko-normálního rozdělení.

Upravená data uloží do nového souboru. Každý nově vygenerovaný soubor je uložen do nové složky pojmenované čtyřmístným číslem. Název začíná na čísle „0001“ a s každou novou složkou vzrůstá o jedničku.

3.2.1 Soubor materiálů

První tři materiály ze souboru vygenerovaného programem „Flow parse“.

```
$Materials
37068
22000001 21 7200
22000002 21 7200
22000003 21 7200
```

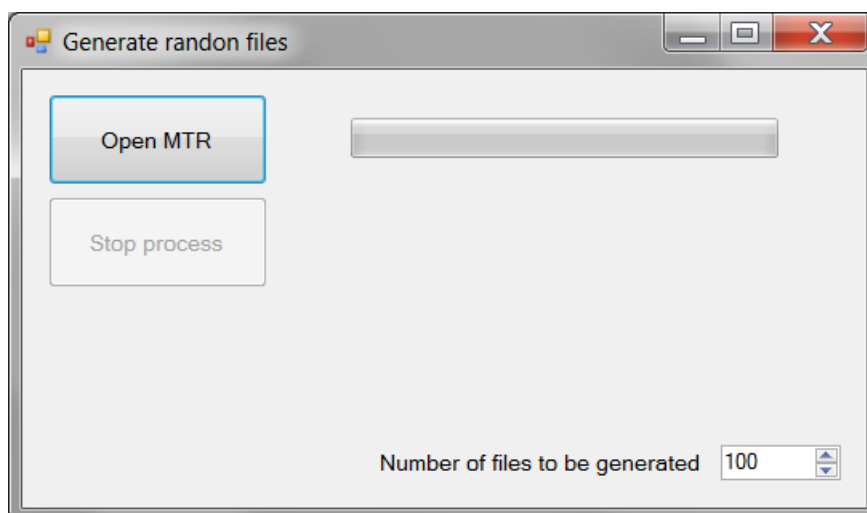
Z uvedené části souboru je vidět, že by počet materiálů byl rozšířen na skutečný počet elementů (37068), tak homogenost modelu se nezměnila. To indikuje opakující se hydraulická vodivost s hodnotou 7200 m/rok.

Stejně materiály u nově vygenerovaného souboru programem „Generate random files“.

```
$Materials
37068
22000001 21 3969
22000002 21 13980
22000003 21 3593
```

3.2.2 Manuál k programu Generate random files

Úvodní okno programu (obrázek 7) obsahuje dvě tlačítka a ukazatel průběhu generování souborů. V dolní pravém rohu je editovatelné pole, které indikuje, kolik souborů materiálů bude vygenerováno.



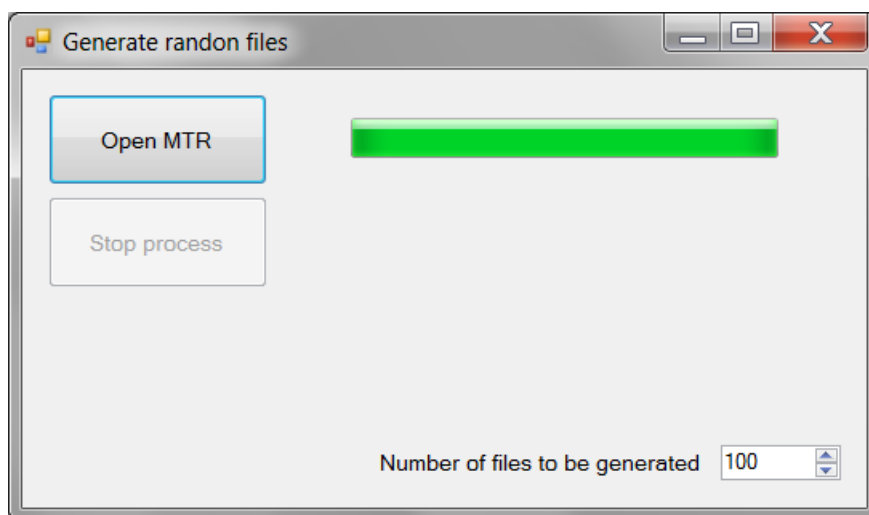
Obrázek 7: Okno programu Generate random files

Uživatel by po spuštění programu měl určit kolik datových souborů chce vygenerovat. Defaultní hodnota je nastavena na jeden soubor. Z obrázku 7 je vidět, že bude generováno sto souborů.

V dalším kroku uživatel vybírá soubor materiálů, kliknutím na tlačítko „Open MTR“ se otevírá dialogové okno, které umožňuje zvolit soubor pouze s příponou *.mtr. Okamžitě po potvrzení výběru uživatelem začíná program číst data o materiálech a generovat zvolené množství datových souborů materiálů, které mají již příslušně upravenou hydraulickou vodivost.

Celý průběh zpracování je možné kdykoli přerušit tlačítkem „Stop process“, které je aktivní v průběhu zpracování. Průběh zpracování je opět patrný z lišty průběhu zpracování.

Stav programu po úspěšném vygenerování všech souborů ilustruje obrázek 8. Vygenerování 100 datových souborů sítě trvalo na osobním počítači zhruba 42s.



Obrázek 8: Okno program Generate random files po úspěšném vygenerování souborů

Popis vybraných součástí kódu tvořící tento program je uveden jako příloha C.

4 Výpočetní jednotka, cluster Hydra

Větší množství úloh nelze jednoduše řešit na osobních počítačích. Pro tyto účely disponuje Ústav nových technologií Technické univerzity Liberec výpočetním clusterem s názvem „Hydra“.

V rámci bakalářské práce bylo zapotřebí vypočítat 100 úloh transportu s rozdílnými vstupními daty, které byly vygenerovány pomocí softwaru „Flow parser“ a „Generate random files“. Protože každá úloha by byla velmi časově náročná – řádově hodiny, bylo využito clusteru Hydra, kdy každá úloha byla řešena paralelně na jednotlivých jádrech clusteru.

Celková výpočetní kapacita clusteru je 82 jader (58 CPU). Operačním systémem běžícím na Hydře je Linux CentOS verze 5.4 [10]. Aktuální zátěž clusteru je k dispozici online na <http://hydra.kai.tul.cz/ganglia/>.

K Hydře je možné přistupovat vzdáleně pomocí programu PuTTY nebo klienta s podporou SFTP (WinSCP) pro nahrávání souborů.

Detailní parametry výpočetního clusteru Hydra jsou uvedeny na stránkách <http://www.nti.tul.cz/cz/Hydra/techdetails>.

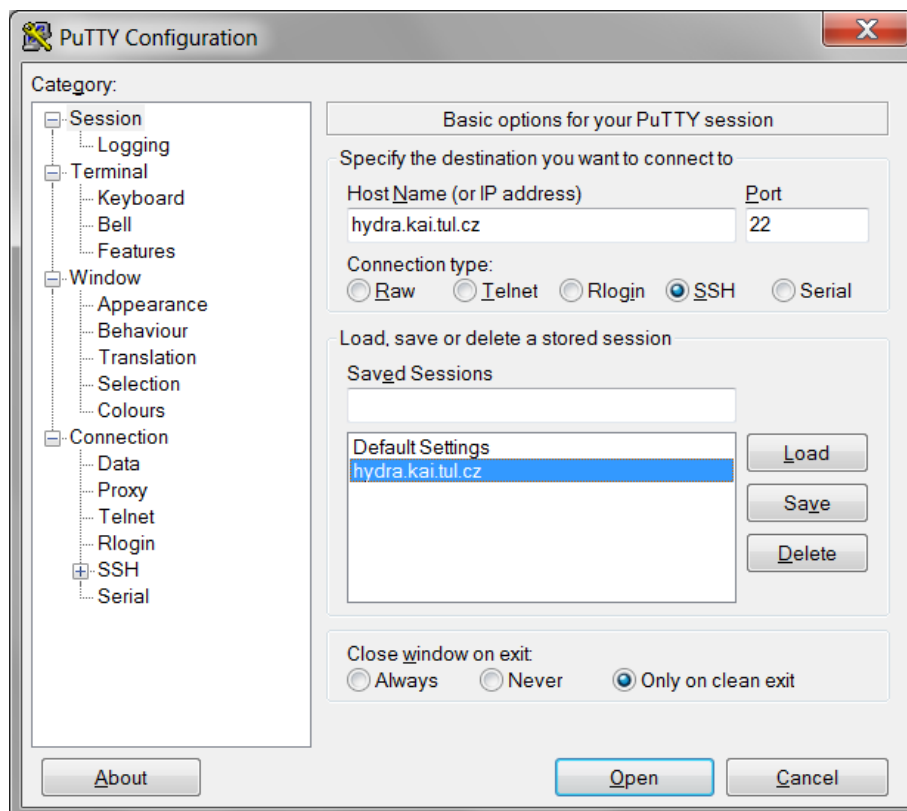
4.1 Komunikace s výpočetním clusterem

K výpočetní jednotce není možné fyzicky přistupovat. Jedinou možností jak s clusterem komunikovat (vytvářet adresáře, kompilovat programy, spouštět výpočty...), je vzdáleně pomocí zabezpečeného protokolu SSH.

Vzdálené připojení k systému je možné realizovat pomocí programu PuTTY. Jedná se o multiplatformní emulátor terminálu. Podporuje řadu síťových protokolů jako jsou SSH, Telnet, Rlogin a raw TCP. Program je šířen pod svobodnou licencí MIT (Massachusetts Institute of Technology).

Při realizaci práce se PuTTY využívá k připojení systému na bázi unixu, který je nainstalován na univerzitním clusteru Hydra. Je využíván například ke kompilaci programu Flow123D, spouštění nejrůznějších skriptů a dávek k provedení výpočtů.

Po spuštění programu PuTTY se otevře konfigurační okno (obr. 9). Z obrázku je patrné, že k připojení k serveru hydra.kai.tul.cz byl použit protokol SSH a portu číslo 22.



Obrázek 9: Hlavní konfigurační dialog programu PuTTY

Potvrzení tlačítkem „Open“ vyvolá terminálové okno s požadavkem na uživatelské jméno a následně i heslo, terminálové okno po úspěšném přihlášení ukazuje obrázek 10.



Obrázek 10: Terminálové okno po úspěšném přihlášení (barvy obrázku byly dodatečně zinvertovány)

4.2 Nahrání souborů na výpočetní cluster

Pro přenos souborů na cluster je možné použít jakýkoli souborový manager s podporou protokolu SFTP (Secure FTP over SSH). Na server není možné se připojit jen pomocí běžnějšího FTP. Mezi programy podporující protokol SFTP například WinSCP.

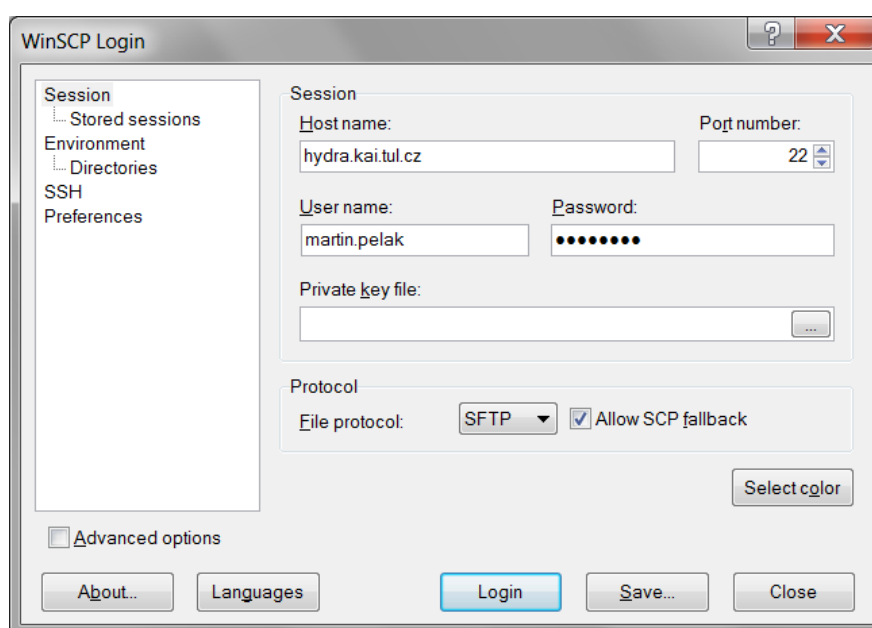
Pro připojení byly použity následující údaje:

Host name: hydra.kai.tul.cz

Port: 22

A přidělené uživatelské jméno a heslo správcem serveru.

Příklad správně vyplněných údajů v programu WinSCP je vidět na obrázku 11.



Obrázek 11: Okno programu WinSCP po spuštění

5 Příprava dat pro výpočet transportu v heterogenním prostředí

Matematický model popisující melechovský masiv, který je součástí výchozí úlohy, je značně homogenní. Cílem přípravy vstupních dat pro výpočet je připravit sadu požadovaného množství úloh s heterogenním modelem horninového masivu. Heterogenity bude dosaženo zvýšením počtu materiálů a simulováním velikosti hydraulické vodivosti z logaritmicko-normálního rozdělení ve vstupních datových souborech mm.mtr a mm.msh.

Počátečním krokem v procesu přípravy sady úloh je navýšení počtu materiálů ve výchozí úloze. Toho bylo dosaženo programem „Flow parser“. Program zvyšuje počet materiálů na skutečný počet elementů. Nově vygenerované materiály jsou přiřazeny všem elementům a mají stejnou hydraulickou vodivost jakou měl element před úpravou programem „Flow parser“.

Všechny úlohy budou obsahovat kompletně identické vstupní soubory až na datový soubor s definicí materiálů *.mtr. Každá úloha bude mít jedinečný soubor *.mtr. Počet materiálů v každé úloze bude stejný, jediný rozdíl bude v hydraulické vodivosti materiálů.

Program „Generate random files“ byl naprogramován, aby ze souboru materiálů mm.mtr s navýšeným počtem materiálů generoval libovolný počet datových souborů s upravenou hydraulickou vodivostí všech elementů. Každý datový soubor *.mtr vygenerovaný tímto programem je uložen do svého jedinečně pojmenovaného adresáře (0001, 0002...).

Z důvodů optimálního využití výpočetního cluster je doporučeno, aby se úlohy spouštěly pomocí plánovače úloh, tím je program Sun Grid Engine (SGE). Námi požadovaný výpočet musí být zapsán do skriptu a následně předán plánovači úloh. Skript musí být obsažen v každé složce úlohy. Stručný popis takového skriptu je proveden v kapitole 6.1.

Požadovaného počtu sta úloh bude dosaženo rozkopírováním úlohy s navýšeným počtem materiálů, která byla doplněna o skript pro přidání do plánovače úloh. Po hromadném vytvoření kopií popsané úlohy bude každá složka úlohy dále doplněna o soubor s definicí materiálů mm.mtr, který je pro každou úlohu jedinečný.

Rozkopírování úlohy je možné dosáhnout přímo na výpočetním clusteru pomocí níže uvedeného skriptu. Nahrání úlohy bylo realizováno pomocí programu WinSCP. Skript pro rozkopírování souboru byl spuštěn prostřednictvím programu PuTTY.

```
for i in {1..100};  
do  
    printf -v path '%04d' "$i"; cp -R ./uloha ./${path};  
done
```

Tento skript napsaný pro unixový shell – bash předpokládá v aktuálním adresáři existenci složky s názvem „uloha“. Tu rozkopíruje včetně jejího obsahu (stokrát) do aktuálního adresáře. Jednotlivé složky úloh jsou pojmenovány číselným názvem (0001 až 0100).

Z programu „Generate random files“ bylo vygenerováno sto složek (0001 až 0100). Každá ze složek obsahuje soubor mm.mtr s navýšeným počtem materiálů a upravenou hydraulickou vodivostí. Názvy složek rozkopírovaných úloh a složek vygenerovaných programem „Generate random files“ jsou shodné. Všechny složky byly překopírovány na výpočetní cluster „Hydra“ pomocí souborového manageru WinSCP tak, aby došlo k jejich sloučení s rozkopírovanými úlohami.

5.1 Dávkový soubor flow.sh pro výpočet úlohy transportu kontaminantů

Jedná se o bash script, který obsahuje instrukce pro spuštění programu Flow123D. Soubor flow.sh obsahuje cestu k programu Flow123D doplněnou o parametry „-s“ a „flow_t.ini“. Po spuštění skriptu dojde ke spuštění výpočtu úlohy.

```
#!/bin/bash  
#  
#$ -cwd  
#$ -j y  
#$ -S /bin/bash  
#  
${HOME}/flow123d/branches/1.6.0_modular/bin/flow123d -s  
flow_t.ini
```

5.2 Hromadné předání výpočtů plánovači úloh

Přidávání všech vytvořených úloh do fronty plánovače úloh SGE bylo dosaženo vytvořením bash skriptu „davka.sh“. Skript prochází všechny podsložky úloh. V těchto podsložkách hledá soubor „flow.sh“. Při úspěšném nález souboru přidá úlohu k výpočtení do fronty programu plánovače. Samotné přidání úlohy do fronty je vykonáváno pomocí příkazu qsub.

Následuje seznam parametrů určený pro SGE

- -cwd – výstup bude zapsán do aktuálního pracovního adresáře
- -j y – spojí výstupní soubor se souborem chybovým, výstupem je tedy jeden soubor
- -S /bin/bash – specifikujeme interpret scriptu

```
#!/bin/bash
```

```
# soubor umistit do adresare ve kterem jsou adresare s ulohami
# nemusi byt nutne ocislovane - skript si poradí i se jmeny
#
# jmeno davkoveho souboru
BF="flow.sh"
```

```
# QSUB
# -j y spojit stdout a stderr do jedineho vystupu (jinak
generuje dva samostane logy)
# -cwd při spustení jobu změnit working dir na adresar, ve
kterem byl spusten QSUB!
# -b y ber nasledující parametr jako jmeno binarky ke spusteni
# -S /bin/bash pro shell pouzij toto
```

```
for file in *; do
    if [ -d "$file" ]; then

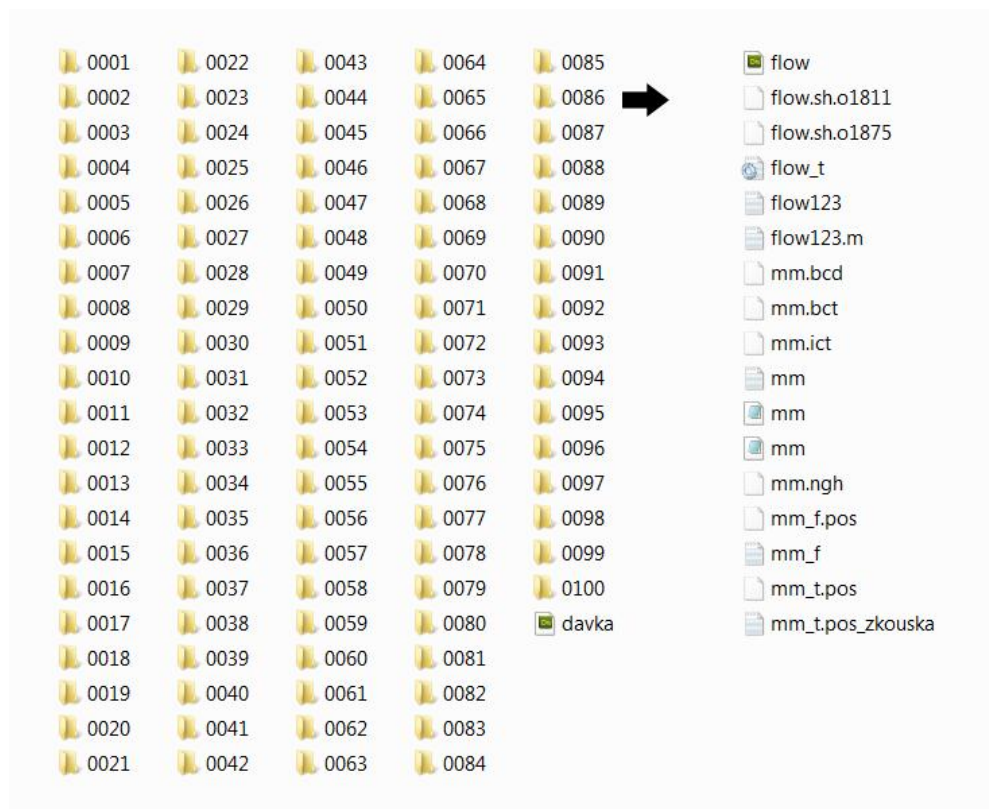
        echo "Submit: $file/$BF"
        # uloz si aktualni pracovni adresar
        wd=`pwd`

        cd $file
        qsub -j y -cwd -S /bin/bash $BF

        #vrat se zpet
        cd $wd
    fi
done
```

Všechny připravené složky k výpočtu včetně skriptu „davka.sh“ ukazuje obrázek 12. V jeho pravé části je vidět detailní výpis souborů jedné složky.

Skript „davka“ je možné spustit pomocí příkazu `sh davka.sh`.



Obrázek 12: Struktura vstupních dat pro výpočet

6 Zpracování vypočtených dat

Všechny výsledky výpočtů úloh transportu jsou uloženy ve výstupních souborech mm_f.pos, mm_f.txt a mm_t.pos. Soubory mm_f.pos a mm_f.txt popisují proudění podzemní vody v melechovském masivu. Tyto soubory nebudou využity pro další části analýzy. Soubor mm_t.pos obsahuje hodnotu koncentrace na jednotlivých elementech oblasti v časovém rozpětí 0 – 50 000 let odstupňovaných po 5 000 letech.

Okrajová podmínka modelu je uvažována v bezrozměrných jednotkách (je definována hodnotou 1 000 000) a výsledné koncentrace kontaminantu na elementech jsou uvažovány v jednotkách ppm (part per milion) původní hodnoty okrajové podmínky.

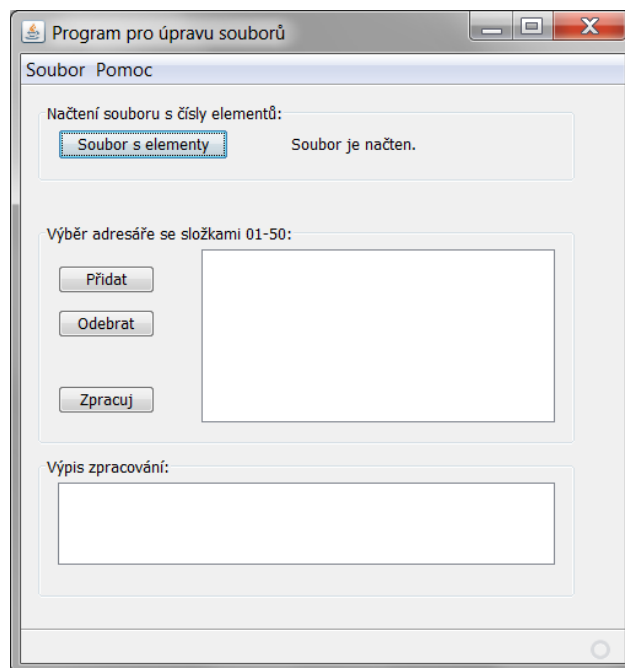
6.1 Výběr povrchových elementů

Při zpracování výsledků výpočtů se budeme soustředit na významné tj. povrchové elementy modelu. Povrchové elementy jsou významné především z možného důvodu přechodu radioaktivních prvků do biosféry. Seznam povrchových elementů je součástí přílohy D této práce.

Pro získání koncentrací vztahujících se k povrchovým elementům byl využit program s názvem „Program na úpravu souborů“, který vznikl jako ročníkový projekt a jeho autorem je Pavel Tregl [7].

Software přijímá jako vstup seznam významných elementů v podobě textového souboru a následně složky úloh, které obsahují výstupní soubory z programu Flow 123D. Program na úpravu souborů dokáže zpracovat pouze složky pojmenované dvoumístným číslem od 01 do 50.

Po zadání všech potřebných údajů program vybírá významné elementy s jejich koncentrací a hodnoty koncentrace daného elementu vzestupně seřadí. V případě úspěšného zpracování programem pak každá úloha obsahuje soubor mm_t.pos_zkouska.txt se seřazenými daty.



Obrázek 13: Program pro úpravu souborů

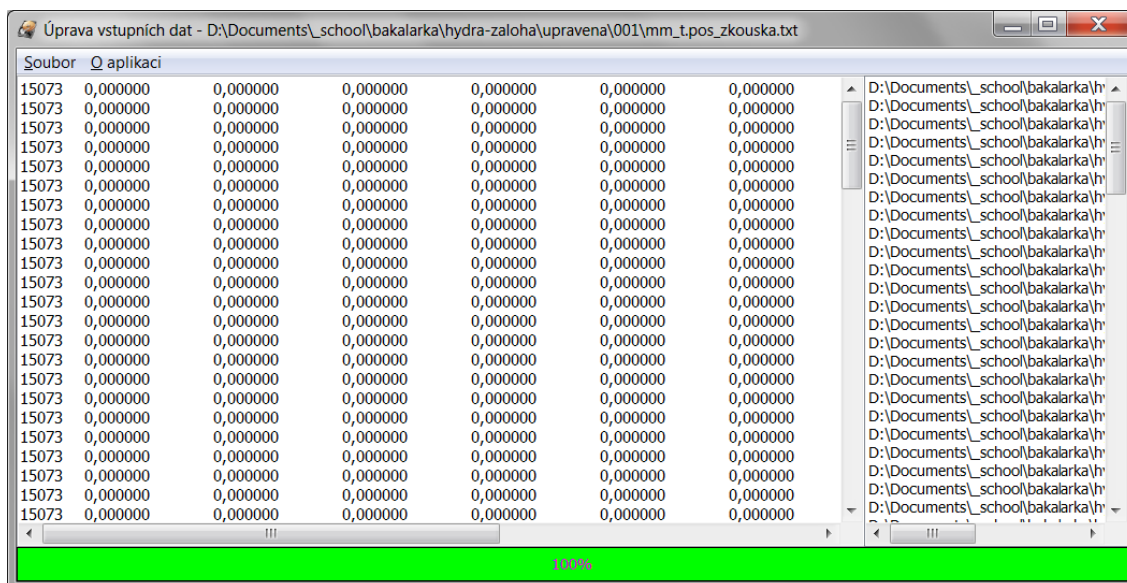
6.2 Uložení koncentrací elementů v čase z více úloh

Při dalším zpracování souborů byl použit program s názvem „Úprava vstupních dat“, který je součástí diplomové práce Zdeňka Salaby [8].

Tomuto programu je jako vstup předávána sada adresářů, nejčastěji vypočtených úloh po aplikaci programu (Program na úpravu souborů). Program prochází předané složky a hledá textové soubory `mm_t.pos_zkouska.txt`, které by měly být součástí každé složky.

Ze všech načtených souborů vybírá jednotlivé povrchové elementy a jejich koncentrace ve všech časových krocích. Každému elementu je vyhrazen zvláštní soubor, který obsahuje vzestupně seřazené koncentrace ze všech vypočtených úloh v jednotlivých zaznamenaných časových okamžicích. Vypočtené koncentrace z každé úlohy jsou v souboru odděleny vždy číslem elementu.

Všechny vygenerované soubory jsou uloženy ve složce HelpFiles.



Obrázek 14: Program na úpravu dat po úspěšném zpracování dat

Načtení všech sta souborů mm_t.pos_zkouska.txt trvalo programu 30 sekund. Následné vygenerování výstupů pak 58 sekund.

6.3 Přetřídění zpracovaných dat

Vypočtená data byla postupně upravena a vyselektována aplikací programů „Program na úpravu souborů“ a „Úprava vstupních dat“. Protože extrahovaná data nejsou ve vhodném formátu k vykreslení pravděpodobnostních grafů koncentrací radioaktivní látky na vybraných elementech, je nutné data dále roztřídit.

Pro tyto účely byl vytvořen nový program „Distribution function“. Tento program postupně načítá všechny soubory Sortedfile<poradove-cislo>.txt uložené ve složce HelpFiles. Data v každém souboru přetřídí a uloží do složky HelpFiles/csv pod názvem Sortedfile<poradove-cislo>.csv.

Obecná struktura načítaného souboru Sortedfile<poradove-cislo>.txt.

```
<cislo-materialu>
<koncentrace-0>      – koncentrace v 0-tem časovém kroku
      |
<koncentrace-n-1>    – koncentrace v n-1 časovém kroku
<koncentrace-n>      – koncentrace v n-tem časovém kroku
```

Obecná struktura výstupního souboru Sortedfile<poradove-cislo>.csv

```
0.005, <koncentrace-0>, ... <koncentrace-n-1>, <koncentrace-n>
      |
0.995, <koncentrace-0>, ... <koncentrace-n-1>, <koncentrace-n>
```

Ukázka možné podoby souboru Sortedfile obsahující koncentrace na elementu 3778 získané ze tří vypočtených úloh postupnou selekcí dat za pomoci programů na úpravu dat.

Sortedfile<poradove-cislo>.txt

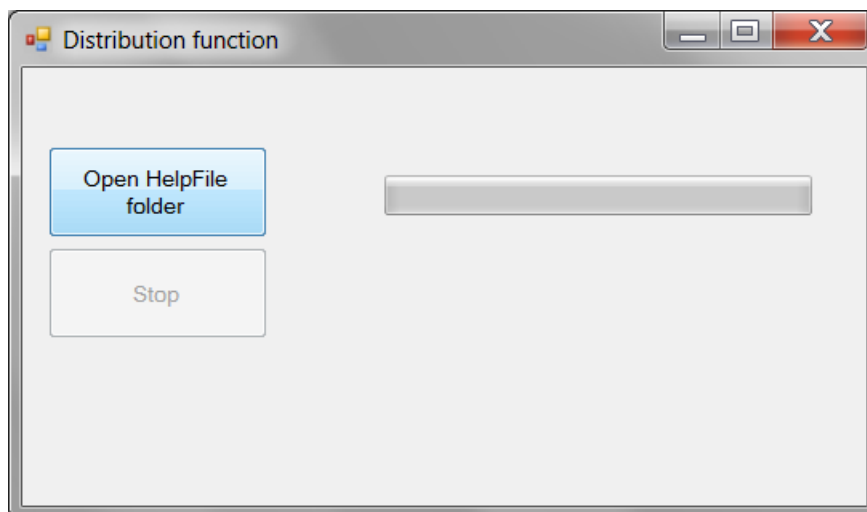
```
3778
0.000000
0.070989
0.138966
0.245692
3778
0.000000
0.016397
0.100964
0.334146
3778
0.000000
0.051695
0.133367
0.584510
```

Sortedfile<poradove-cislo>.csv

```
0.005, 0.000000, 0.000000, 0.000000
0.335, 0.070989, 0.016397, 0.051695
0.665, 0.138966, 0.100964, 0.133367
0.995, 0.245692, 0.334146, 0.584510
```


Z každého jednotlivého souboru je pak možné vykreslit pravděpodobností graf pomocí programu Excel či Matlab. Vykreslení pravděpodobnostních grafů na vybraných významných elementech následuje v kapitole 7.

Okno programu „Distribution function“ ihned po spuštění je vidět na obrázku 15. Obsahuje dvě tlačítka a ukazatel průběhu zpracování souborů.

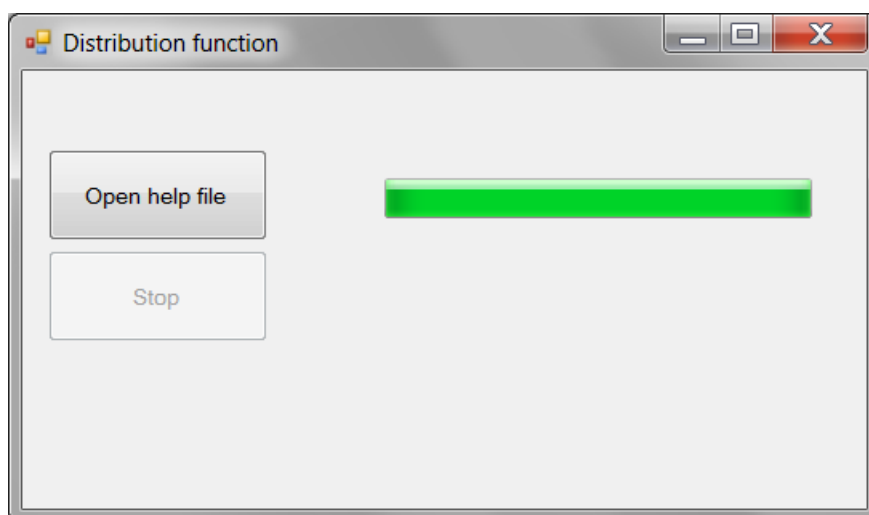


Obrázek 15: Program „Distribution function“ v původním stavu po spuštění

V počáteční fázi uživatel nemá jinou možnost než kliknout na tlačítko „Open HelpFile folder“. Tím je vyvoláno dialogové okno, které umožňuje vybrat umístění složky obsahující textové soubory pro přetřídění. Okamžitě po potvrzení výběru uživatelem je načítán první soubor. Ten je přetříděn a uložen do nově vytvořené složky „csv“. Název nově vygenerovaného souboru se od názvu zdrojového souboru odlišuje pouze příponou *.csv.

Obdobně jako u ostatních programů je možné kdykoli celý průběh zpracování přerušit stisknutím tlačítka „Stop process“, které je aktivní v průběhu zpracování. Průběh zpracování je opět patrný z lišty průběhu zpracování.

Stav programu po úspěšném zpracování a vygenerování nových souborů ilustruje obrázek 16. Přetřídění 100 souborů určených jako datový zdroj pro vykreslení pravděpodobnostních grafů trvalo na osobním počítači necelých 32 s.



Obrázek 16: Okno programu Distribution function po zpracování souborů

7 Pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky

Z vypočtených dat je možné sestavit pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky. Ty udávají pravděpodobnost s jakou koncentrace bude stejná nebo nižší než námi zvolená. Mohou být sestaveny pro jakýkoli element modelu melechovského masivu, nás však především zajímají povrchové elementy.

7.1 Významné elementy

Jako významné elementy byly zvoleny následující tři povrchové elementy:

- 3873
 - 115 – 7981; 4428; 459 m.n.m.
 - 1967 – 7821; 4537; 460 m.n.m.
 - 2505 – 7880; 4497; 298 m.n.m.
 - 3744 – 7826; 4417; 389 m.n.m.
- 3921
 - 1966 – 7870; 4258; 463 m.n.m.
 - 1964 – 7701; 4384; 464 m.n.m.
 - 1967 – 7821; 4537; 460 m.n.m.
 - 3744 – 7826; 4417; 389 m.n.m.
- 3982
 - 3751 – 7953; 4546; 380 m.n.m.
 - 1967 – 7821; 4537; 460 m.n.m.
 - 2505 – 7880; 4497; 298 m.n.m.
 - 115 – 7981; 4428; 459 m.n.m.

Dále byl vybrán jeden element, který není povrchový, ale je na preferenční cestě

- 19768
 - 1337 – 6279; 4619; -95 m.n.m.
 - 2453 – 6148; 4350; 417 m.n.m.
 - 5336 – 6101; 4578; 186 m.n.m.
 - 3297 – 6148; 4350; -89 m.n.m.

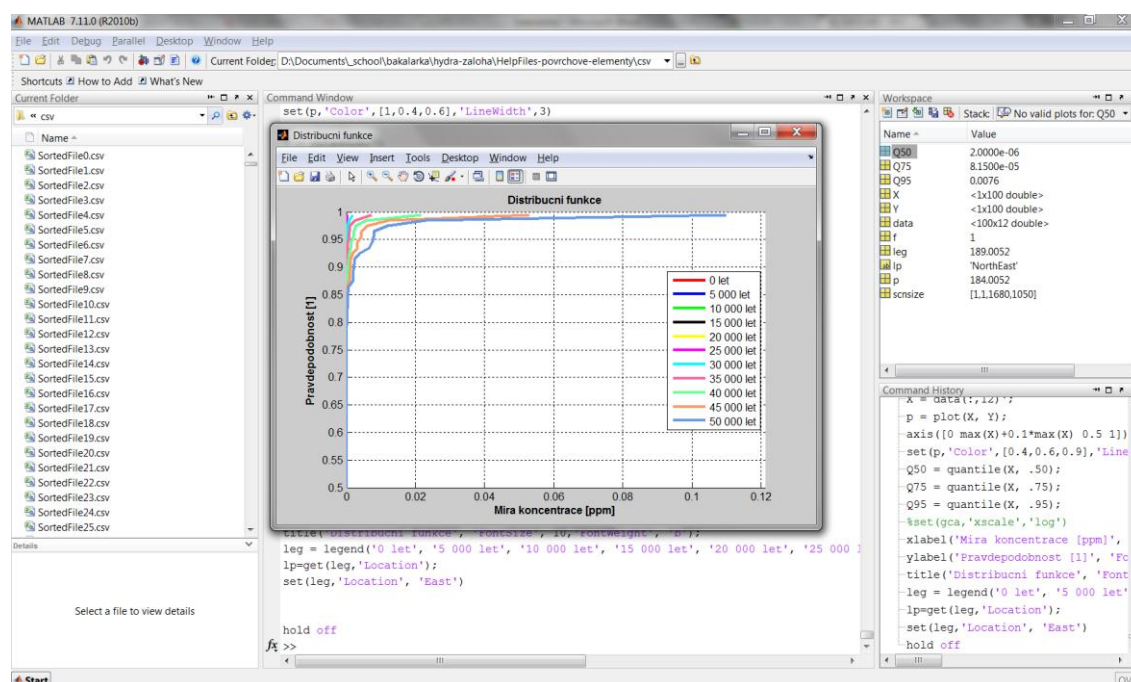
Každý z vybraných elementů je tvořen čtyřmi uzly a všechny uzly jsou doplněny o své souřadnice. Tyto elementy byly zvoleny z důvodu zjištění vyšší koncentrace.

7.2 Vykreslení pravděpodobnostních grafů

K vykreslení pravděpodobnostních grafů byl použit program MATLAB, vyvinutý společností MathWorks.

MATLAB (matrix laboratory) je prostředí pro numerické výpočty a programovací jazyk. MATLAB umožňuje manipulaci s maticemi, modelování, počítačové simulace, analýzu a prezentaci dat, měření a zpracování signálů, implementaci algoritmů, návrhy řídicích a komunikačních systémů a propojení s dalšími programy napsaných v jiných jazycích zahrnující C, C++, Java a Fortran.

Vykreslení grafů je realizováno skriptem, který je uveden jako příloha A. Skript načítá vybraný soubor *.csv z aktivního adresáře (nutno nastavit manuálně na „HelpFiles/csv“) a vykresluje pravděpodobnostní graf. Dále do proměnných Q50, Q75 a Q95 ukládá hodnoty kvantily v 50, 75 a 95%. Obrázek 17 ukazuje program MATLAB po spuštění skriptu.

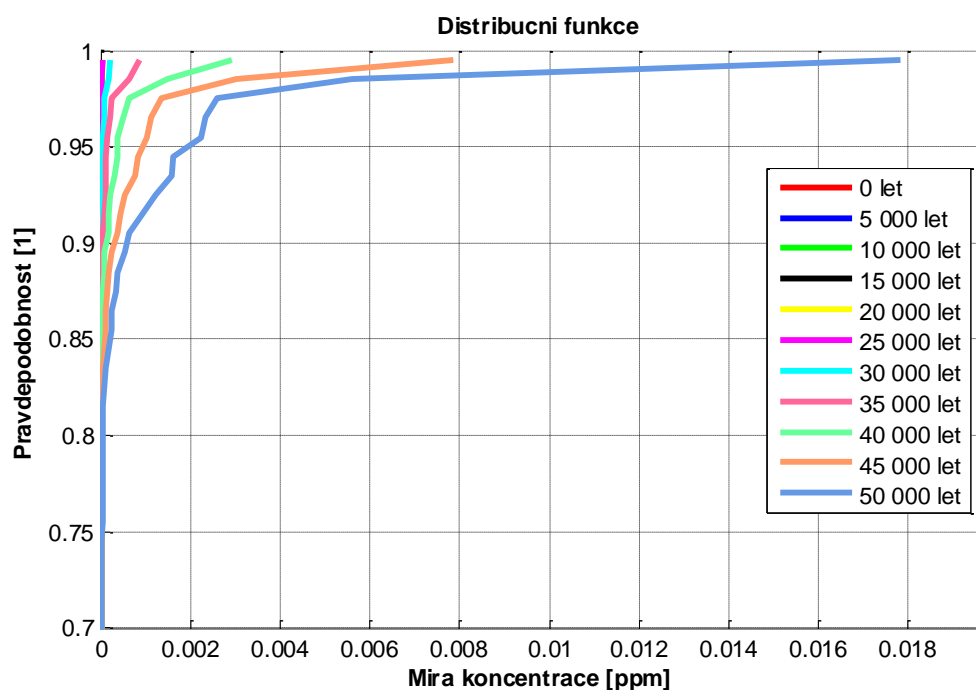


Obrázek 17: Spuštěný program Matlab 7.11.0 (R2010b) s vykresleným grafem

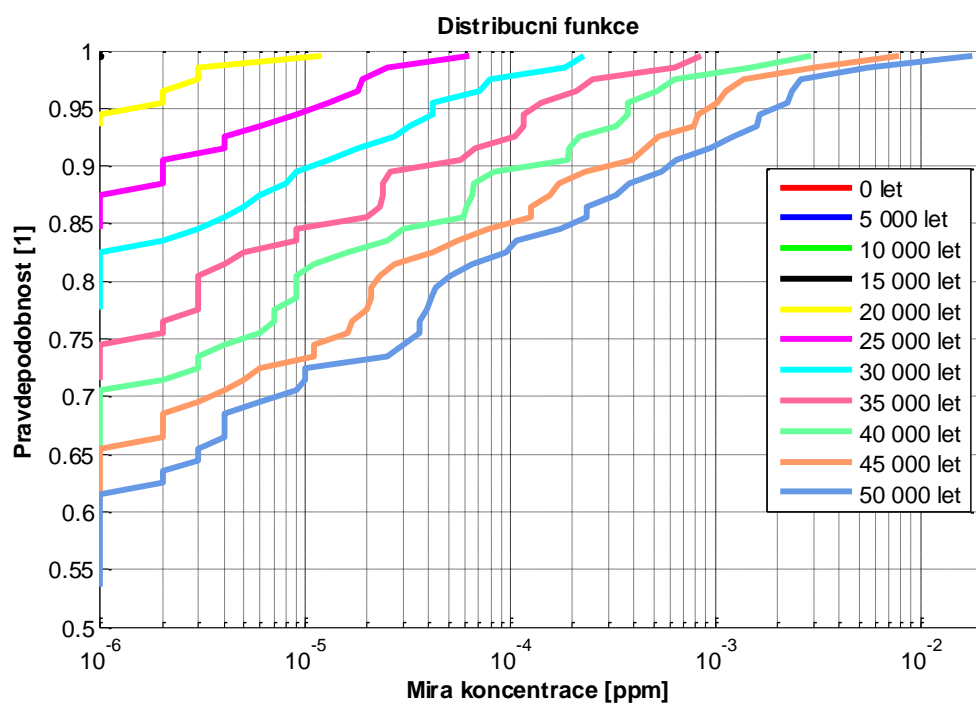
Výsledky koncentrací kontaminantu v čase na zvolených elementech jsou uvedeny v kapitole 7.3. Počáteční koncentrace zdrojového členu byla zvolena na 1 000 000, což představuje hodnotu zdrojového členu v jednotkách ppm (part per milion).

7.3 Výsledky

7.3.1 Výsledky na povrchovém elementu 3873

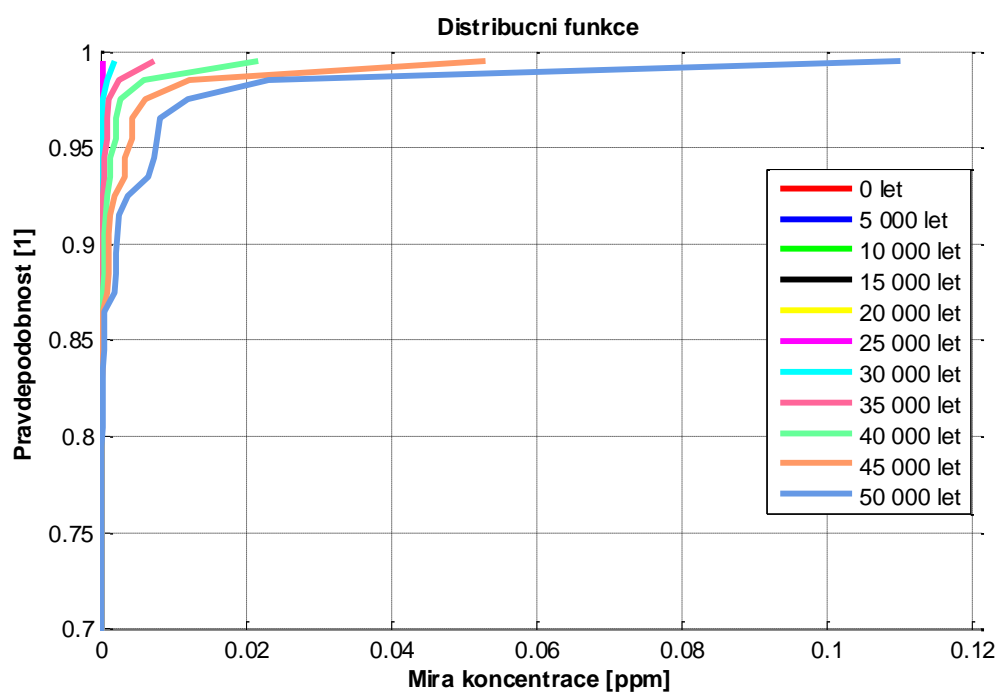


Graf 1: Distribuční funkce – material 3873 (SortedFile204.csv)

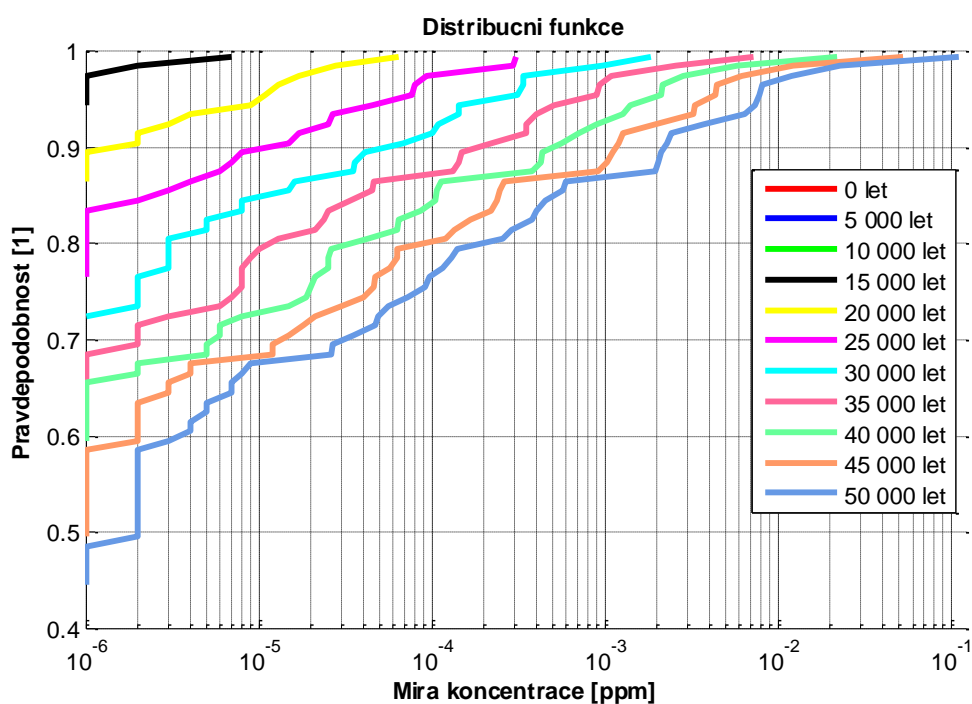


Graf 2: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3873

7.3.2 Výsledky na povrchovém elementu 3921

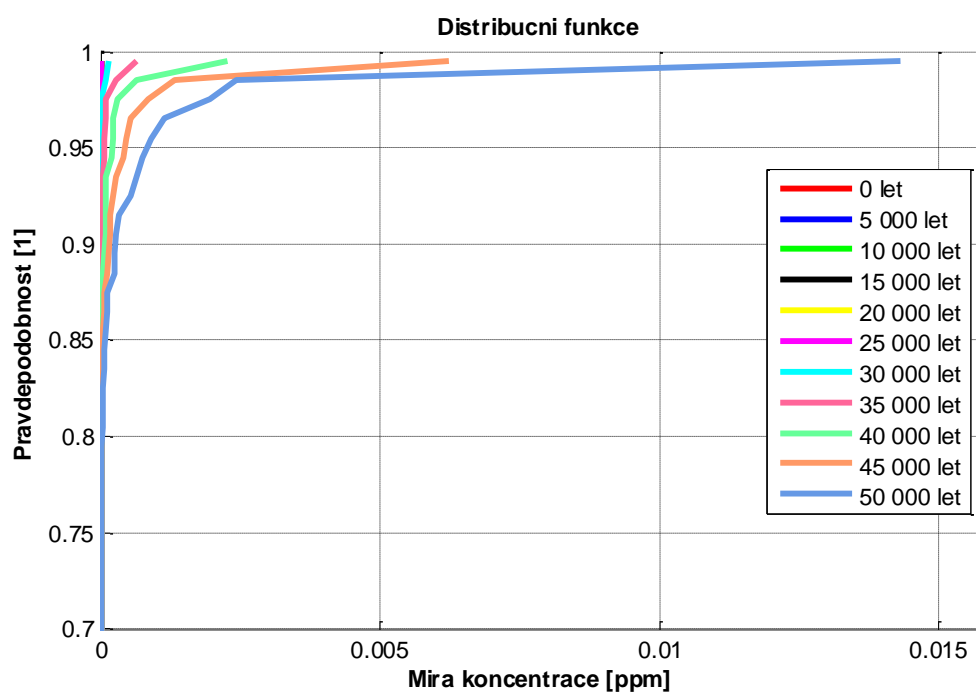


Graf 3: Distribuční funkce – material 3921 (SortedFile215.csv)

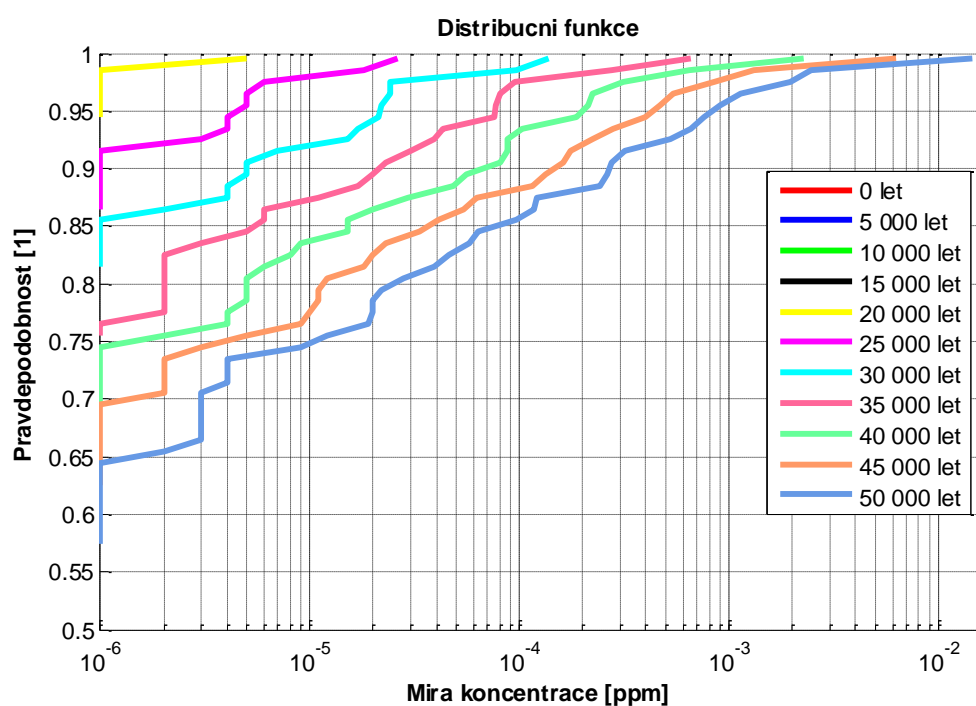


Graf 4: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3921

7.3.3 Výsledky na povrchovém elementu 3982

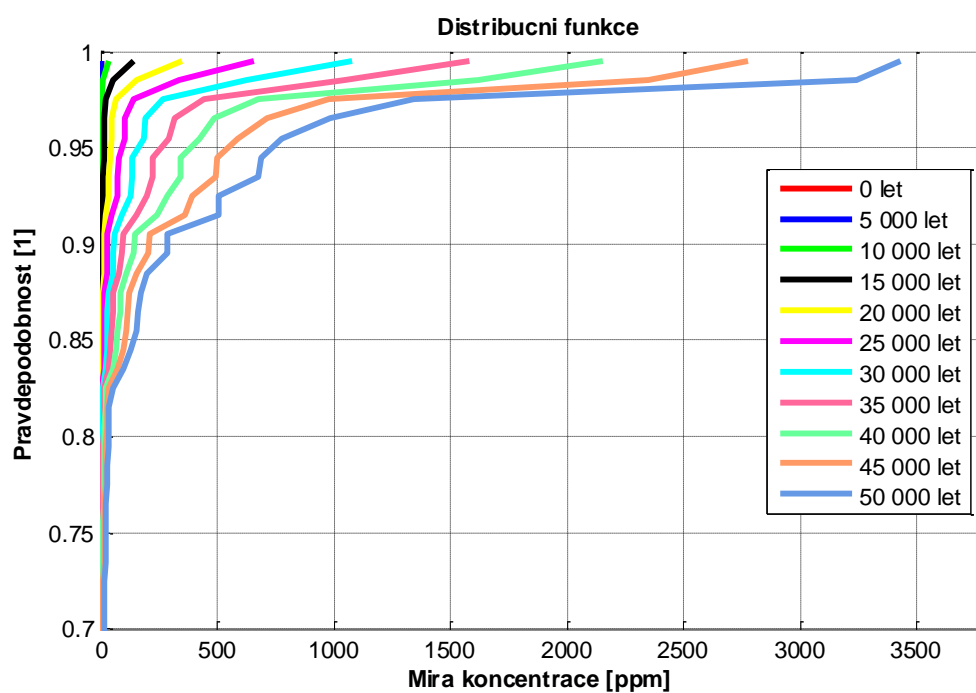


Graf 5: Distribuční funkce – material 3982 (SortedFile228.csv)

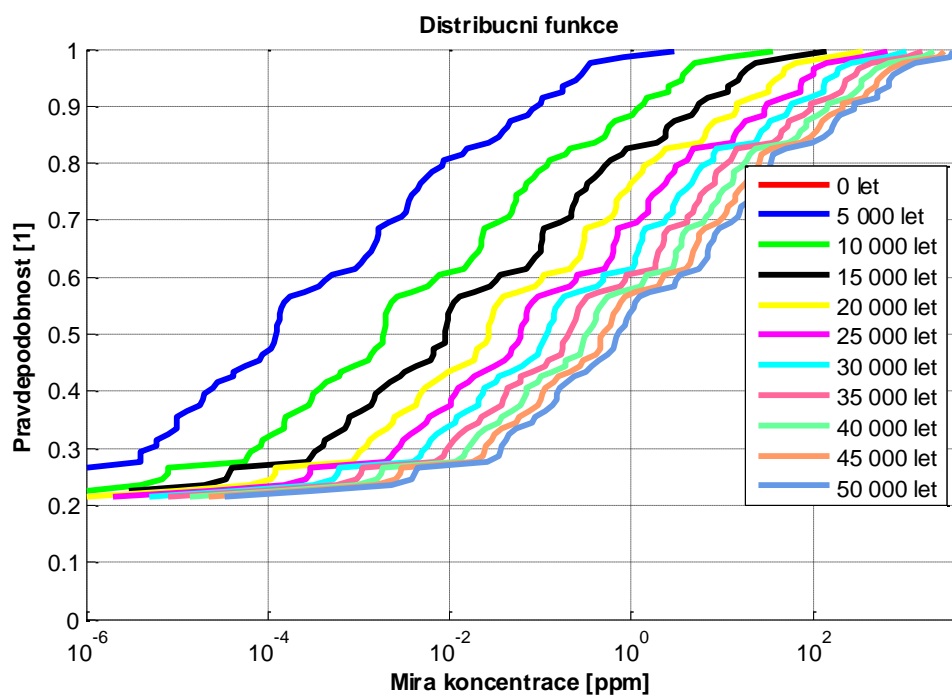


Graf 6: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 3982

7.3.4 Výsledky na elementu 19768



Graf 7: Distribuční funkce – material 19768



Graf 8: Distribuční funkce s logaritmickou osou – material 19768

Z výše uvedených grafů vyplývá, že grafy s logaritmickou koncentrační osou jsou daleko více přehledné než grafy s lineární osou. Do času 50 000 let nedochází k ustálení systému, protože funkce pro čas 45 000, 50 000 nejsou identické, je vhodné prodloužit simulační čas.

Byly vybrány pouze čtyři elementy, grafy by bylo možné vytvořit pro všechny elementy. Na více než 90% povrchových elementů je však nulová koncentrace kontaminantu.

Do tabulky 3 byly zaznamenány kvantily v 50, 75 a 95% pro distribuční funkce v čase 50 000 let.

Tabulka 3: 50, 75 a 95% kvantily pro zvolené elementy

	$Q_{0,5}$	$Q_{0,75}$	$Q_{0,95}$
Element 3873	0 ppm	0,000 033 ppm	0,001 9 ppm
Element 3921	0,000 002 ppm	0,000 081 5 ppm	0,007 6 ppm
Element 3982	0 ppm	0,000 010 5 ppm	0,000 831 ppm
Element 19768	0,703 2 ppm	21,200 1 ppm	7,332 104 ppm

Z distribučních funkcí lze vyčíst pravděpodobnost, s jakou se na zvoleném elementu nevyskytne větší než zvolená (kritická) míra koncentrace kontaminantu.

8 Porovnání rychlosti výpočtů

Jedním z cílů této bakalářské práce bylo zvýšit počet materiálů v modelu na skutečný počet elementů a stanovit vliv změny na rychlost výpočtu.

Porovnání rychlostí výpočtů bylo realizováno na výpočtu dvou úloh. U obou úloh byla prodloužena doba simulace z 50 000 let na 500 000 let, aby došlo k prodloužení doby výpočtu. První úloha (001) obsahuje model sítě bez navýšení počtu materiálů. V druhé úloze (002) byl navýšen počet materiálů za použití programu „Flow parser“. Hydraulické vodivosti materiálů modelu zůstaly zachovány.

Tabulka 4 ukazuje délku doby výpočtů obou úloh na výpočetním cluster „Hydra“. Z tabulky je patrné, že zvýšení počtu nemá praktický vliv na délku výpočtu úlohy.

Tabulka 4: Celková délka výpočtu a počet materiálů v úlohách

	Čas výpočtu	Počet materiálů
Úloha 001	3566,94 s	38
Úloha 002	3564,25 s	37068

Pro získání koncentrací vztahujících se k významným elementům nemohl být použit program s názvem „Program na úpravu souborů“. Jeho výstupem je soubor mm_t.pos_zkouska.txt, obsahující koncentrace na vybraných elementech ve všech časových krocích. Při zpracování úloh s prodlouženou dobou simulace na 500 000 let pak soubor z neznámého důvodu neobsahuje všechny vypočtené koncentrace. Proto koncentrace radioaktivní látky na vybraných elementech byla vyhledána manuálně ze souborů mm_t.pos.

Vybrané koncentrace radioaktivní látky na významných elementech byly zaznamenány do tabulky 5. Všechny koncentrace jsou v obou úlohách totožné.

Tabulka 5: Koncentrace na elementech v čase 500 000 let

	Element 3873	Element 3921	Element 3982	Element 19768
Koncentrace v úloze 001	3.203 266 ppm	3.071 932 ppm	1.950 491 ppm	1012.940 891 ppm
Koncentrace v úloze 002	3.203 266 ppm	3.071 932 ppm	1.950 491 ppm	1012.940 891 ppm

Z délky doby výpočtu obou úloh a porovnaných koncentrací je patrné, že zvýšení počtu materiálů v modelu sítě nemá žádný vliv na dobu výpočtu či přesnost vypočtených dat.

Závěr

Cílem této bakalářské práce bylo stanovení vlivu zvýšení počtu materiálů v modelu úložiště radioaktivního odpadu řešeného pomocí softwaru Flow123D.

Ke zvýšení počtu materiálů v modelu horninového masivu Melechov byly vytvořeny dva programy „Flow parser“ a „Generate random files“.

Byla vytvořena a vypočtena sada 100 úloh. Výsledky vypočtených úloh byly zpracovány programy „Program na úpravu souborů“ a „Úprava vstupních dat“. Jelikož zpracované výsledky nebyly v požadovaném formátu, byl vytvořen program „Distribution function“ k seřídění dat do požadované struktury.

Ze seříděných dat se podařilo sestavit pravděpodobností grafy koncentrace radioaktivní látky na vybraných elementech. Z nich je patrné, že v čase 50 000 let nedochází k ustálení systému, protože funkce pro čas 45 000, 50 000 nejsou identické a je vhodné prodloužit simulační čas.

V práci byl porovnán i vliv zvýšení počtu materiálů na rychlost výpočtů. Z délky doby výpočtů dvou testovacích úloh a porovnaných koncentrací je patrné, že zvýšení počtu materiálů v modelu sítě nemá žádný vliv na dobu výpočtu či přesnost vypočtených dat.

Literatura

- [1] **MARYŠKA J., HOKR M., KRÁLOVCOVÁ J., ŠEMBERA J.** Modelování transportních procesů v horninovém prostředí, 1. vydání, TUL Liberec, Liberec, 2010. 302 s. ISBN 978-80-7372-571-6
- [2] **Severýn O., Hokr M., Královcová J., Březina J., Kopal J.** Tauchman M. Flow123D numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum. Documentation of file formats and brief user manual. Liberec : Technická univerzita v Liberci, 2008.
- [3] **Královcová J., Kopal J., Maryška J., Pelikánová D., Zedek L.** *Hodnocení procesů transportu RN v různých typech hostitelské horniny s různou geologickou stavbou*, Dílčí závěrečná zpráva projektu „Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“, Technická univerzita v Liberci, 2009, 38 stran
- [4] **Rukavičková L.** *Příprava vstupních geologických dat (v širším slova smyslu) pro matematické modelování transportu a geochemické interakce v horizontu stovek tisíců let (DZZ 4.2.). Dílčí závěrečná zpráva projektu „Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“*. Praha : ČGS, 2008.
- [5] **Maryška J., Hokr M., Královcová J., Šembera J.,** *Modelování transportních procesů v horninovém prostředí*, Technická univerzita v Liberci, 2010, ISBN 978-80-7372-571-6
- [6] **Královcová J., Kopal J., Maryška J., Císařová K.,** *Výpočet scénářů vývoje migrace vybraných radionuklidů*, dílčí závěrečná zpráva DZZ 4.6 projektu „Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“, Technická univerzita v Liberci 2009, 29 stran
- [7] **Tregl P.,** *Úprava výstupních textových souborů ze softwaru Flow123D pro jejich další použití v rizikových analýzách, ročníkový projekt*, Technická univerzita v Liberci, 2010.
- [8] **Salaba Z.,** *Vytvoření pravděpodobnostní mapy transportujících se látek z úložiště radioaktivních odpadů na povrchové oblasti, diplomová práce*, Technická univerzita v Liberci, 2011.

[9] **Chudoba J.**, *Citlivostní analýza vstupních parametrů při modelování transportu kontaminantů v hypotetické lokalitě hlubinného úložiště*, Projektová zpráva, Technická univerzita v Liberci, 2010

[10] *NTI – Ústav nových technologií a aplikované informatiky [online]*. 2011 [cit. 2011-04-20]. Hydra. Dostupné z WWW: <http://www.nti.tul.cz/cz/Hydra>

Příloha A - Seznam povrchových elementů

28	30	43	60	63	64	65	71	72	83	85
87	93	96	97	98	181	182	187	208	213	214
263	264	268	272	493	495	496	497	500	503	507
508	510	511	514	515	516	518	519	864	867	1025
1028	1031	1200	1203	1205	1336	1338	1339	1343	1344	1345
1350	1355	2801	2804	2806	2813	3103	3106	3110	3113	3114
3116	3124	3125	3127	3141	3144	3148	3154	3158	3161	3162
3166	3172	3180	3185	3191	3195	3200	3201	3207	3208	3211
3215	3222	3223	3227	3233	3240	3244	3247	3258	3274	3286
3316	3327	3354	3356	3357	3358	3362	3365	3375	3377	3378
3382	3383	3388	3390	3391	3395	3403	3405	3406	3410	3411
3416	3424	3428	3432	3435	3439	3447	3448	3456	3468	3470
3474	3478	3495	3497	3501	3504	3505	3515	3518	3522	3526
3536	3540	3542	3553	3558	3563	3571	3582	3588	3594	3603
3610	3624	3625	3629	3630	3634	3635	3639	3647	3651	3652
3662	3666	3668	3672	3678	3682	3686	3691	3698	3705	3722
3726	3741	3744	3745	3748	3749	3753	3756	3758	3763	3768
3769	3773	3778	3785	3794	3798	3802	3804	3805	3810	3814
3830	3841	3858	3861	3865	3869	3873	3885	3889	3893	3894
3901	3906	3907	3909	3910	3912	3921	3926	3936	3938	3939
3941	3942	3953	3960	3961	3962	3963	3971	3982	3988	3990
3996	3997	4003	4016	4022	4023	4025	4027	4035	4038	4063
4064	4066	4068	4071	4075	4077	4086	4092	4096	4099	4113
4114	4120	4122	4128	4131	4133	4134	4136	4137	4142	4163
4181	4183	4188	4223	4276	4279	4281	4283	4285	4291	4298
4308	4309	4319	4320	4324	4329	4331	4332	4333	4338	4342
4345	4348	4349	4351	4355	4356	4357	4363	4364	4366	4369
4373	4375	4386	4389	4393	4397	4399	4402	4405	4408	4411
4421	4422	4424	4432	4435	4439	4466	4469	4470	4482	4494
4514	4524	4557	4558	4559	4562	4566	4567	4570	4572	4574
4577	4580	4581	4583	4584	4593	4595	4597	4600	4609	4614
4619	4627	4650	4653	4657	4661	4667	4670	4681	4684	4697

4701	4702	4706	4713	4767	4770	4772	4773	4774	4779	4782
4792	4794	4802	4806	4808	4809	4811	4819	4824	4827	4834
4837	4839	4845	4849	4851	4853	4860	4867	4871	4875	4879
4883	4888	4891	4893	4894	4899	4908	4924	4928	4931	4934
4954	4956	4966	4969	4973	4974	4977	4984	4988	4994	4999
5000	5001	5003	5006	5010	5025	5041	5042	5043	5047	5049
5051	5053	5057	5058	5060	5064	5074	5086	5104	5119	5120
5122	5123	5126	5131	5134	5136	5139	5143	5151	5153	5159
5165	5174	5178	5180	5182	5195	5197	5204	5206	5215	5253
5271	5283	5288	5289	5290	5294	5297	5314	5315	5317	5318
5319	5322	5324	5332	5333	5336	5344	5346	5349	5351	5353
5354	5357	5360	5363	5367	5372	5373	5375	5382	5386	5397
5408	5417	5422	5425	5427	5429	5441	5448	5462	5480	5490
5497	5498	5520	5521	5537	5549	5552	5554	5556	5560	5561
5563	5564	5567	5568	5571	5572	5577	5578	5582	5583	5587
5590	5591	5592	5594	5611	5615	5622	5627	5641	5645	5647
5655	5674	5683	5690	5702	5703	5720	5725	5727	5742	5750
5752	5754	5755	5758	5760	5762	5764	5770	5773	5774	5778
5779	5790	5792	5794	5804	5820	5824	5825	5831	5833	5838
5842	5847	5864	5868	5870	5878	5893	5899	5904	5930	5935
5960	5962	5967	6011	6022	6024	6026	6027	6029	6031	6032
6034	6040	6043	6049	6063	6065	6067	6068	6069	6070	6073
6079	6081	6087	6090	6093	6095	6096	6098	6100	6102	6104
6108	6109	6110	6113	6116	6122	6126	6127	6141	6161	6169
6171	6181	6194	6195	6199	6206	6208	6209	6213	6221	6223
6229	6232	6236	6256	6266	6269	6272	6287	6290	6292	6305
6306	6307	6310	6312	6313	6315	6317	6318	6325	6330	6341
6345	6350	6374	6396	6404	6407	6420	6425	6426	6427	6428
6430	6431	6441	6447	6448	6456	6460	6463	6465	6470	6473
6478	6481	6484	6489	6505	6509	6518	6523	6530	6539	6549
6557	6561	6563	6570	6571	6581	6588	6591	6612	6620	6623
6627	6631	6638	6639	6645	6650	6652	6654	6660	6662	6666
6672	6677	6704	6705	6706	6707	6708	6709	6711	6716	6728

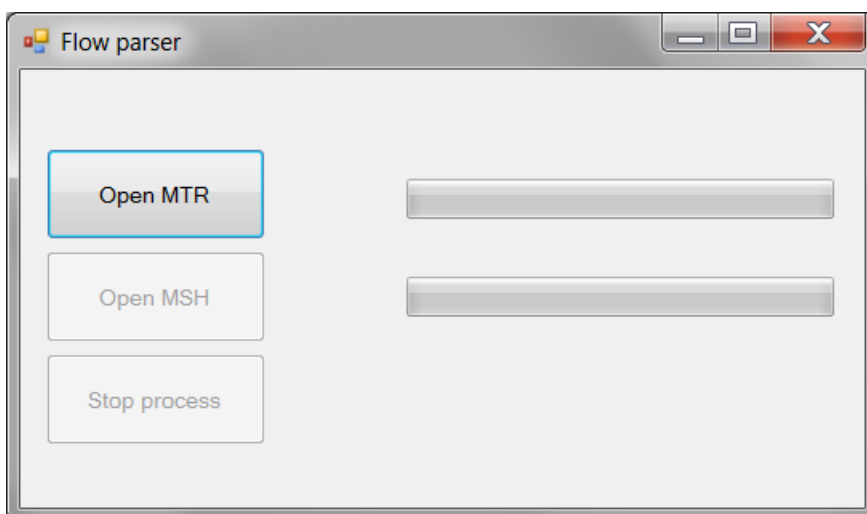
6740	6743	6747	6752	6753	6755	6771	6781	6783	6792	6797
6805	6810	6811	6816	6831	6846	6849	6865	6907	6913	6916
6918	6930	6936	6942	6943	6944	6948	6950	6952	6955	6957
6958	6961	6962	6963	6965	6968	6971	6972	6979	6981	6986
6987	6989	6993	6997	7005	7010	7031	7035	7038	7042	7046
7053	7060	7062	7064	7070	7089	7092	7107	7109	7125	7143
7148	7152	7153	7154	7155	7156	7157	7158	7160	7165	7168
7172	7177	7178	7181	7185	7193	7215	7219	7226	7227	7229
7235	7237	7239	7243	7254	7255	7286	7327	7333	7334	7340
7343	7345	7348	7353	7355	7357	7363	7371	7373	7374	7379
7380	7381	7383	7388	7389	7393	7400	7403	7413	7417	7421
7424	7428	7432	7446	7447	7457	7480	7481	7488	7491	7494
7495	7500	7532	7542	7604	7606	7607	7608	7613	7615	7625
7627	7628	7635	7637	7638	7641	7645	7646	7650	7653	7655
7658	7662	7664	7666	7675	7682	7685	7687	7689	7692	7695
7700	7703	7706	7715	7723	7725	7738	7741	7745	7746	7759
7768	7772	7776	7781	7786	7791	7793	7797	7803	7805	7806
7815	7819	7830	7837	7841	7855	7860	7861	7863	7867	7883
7890	7897	7949	7960	7963	7965	7967	7970	7974	7979	7980
7982	7987	7993	8003	8004	8006	8010	8016	8017	8018	8019
8021	8023	8025	8027	8037	8038	8046	8047	8052	8054	8065
8068	8074	8078	8080	8094	8098	8101	8107	8129	8135	8137
8138	8142	8151	8157	8161	8185	8189	8193	8195	8203	8206
8216	8235	8238	8251	8257	8286	8292	8294	8297	8298	8300
8301	8302	8304	8306	8310	8313	8314	8315	8316	8335	8337
8348	8356	8367	8372	8375	8386	8390	8393	8396	8401	8403
8407	8410	8411	8412	8435	8438	8441	8442	8443	8459	8467
8471	8479	8488	8492	8512	8513	8514	8530	8535	8536	8542
8545	8546	8548	8552	8555	8560	8565	8569	8574	8575	8577
8580	8590	8591	8595	8602	8610	8628	8629	8633	8636	8641
8669	8679	8680	8686	8688	8690	8694	8695	8698	8703	8713
8715	8727	8731	8738	8744	8748	8753	8755	8757	8760	8762
8763	8775	8778	8780	8795	8796	8803	8805	8807	8810	8815

8817	8818	8820	8821	8828	8831	8832	8843	8846	8856	8864
8868	8874	8877	8892	8911	8916	8929	8930	8932	8933	8936
8940	8945	8948	8949	8953	8954	8958	8962	8964	8968	8974
8988	8989	8994	8998	9003	9006	9017	9018	9020	9022	9028
9037	9038	9041	9048	9062	9066	9067	9070	9075	9079	9084
9086	9098	9099	9116	9117	9118	9172	9217	9223	9244	9275
9321	9372	9373	9385	9392	9393	9395	9399	9400	9402	9403
9407	9408	9410	9414	9416	9417	9423	9425	9427	9428	9433
9451	9452	9453	9454	9455	9459	9460	9462	9466	9473	9477
9479	9481	9484	9492	9495	9500	9501	9502	9508	9514	9528
9531	9533	9534	9544	9546	9551	9559	9563	9564	9566	9578
9580	9586	9587	9589	9590	9593	9594	9595	9598	9599	9600
9605	9612	9617	9622	9628	9635	9636	9637	9639	9641	9642
9647	9648	9652	9654	9658	9665	9671	9674	9680	9684	9688
9691	9701	9703	9704	9705	9710	9715	9730	9732	9736	9743
9763	9768	9773	9784	9786	9795	9805	9811	9814	9815	9822
9838	9839	9853	9865	9866	9877	9899	9900	9902	9909	9912
9914	9917	9920	9921	9928	9932	9946	9949	9960	9967	9977
9987	9991	10072	10079	10131	10164	10167	10170	10174	10179	10180
10188	10190	10191	10192	10194	10197	10198	10199	10201	10202	10205
10206	10209	10210	10211	10217	10218	10220	10221	10233	10236	10240
10241	10243	10245	10248	10250	10253	10255	10256	10261	10270	10276
10278	10280	10282	10283	10285	10290	10293	10295	10299	10303	10304
10308	10309	10313	10315	10320	10322	10328	10333	10341	10343	10344
10354	10359	10367	10383	10388	10390	10403	10404	10408	10424	10433
10434	10435	10450	10451	10452	10461	10467	10472	10482	10486	10488
10490	10511	10514	10518	10523	10526	10527	10529	10533	10535	10540
10542	10561	10570	10587	10611	10620	10636	10639	10641	10647	10650
10654	10655	10657	10662	10663	10664	10667	10668	10675	10680	10681
10684	10686	10689	10693	10695	10698	10699	10702	10704	10706	10713
10724	10728	10739	10748	10750	10752	10762	10776	10779	10784	10791
10795	10809	10811	10815	10819	10834	10846	10848	10855	10867	10870
10871	10889	10892	10894	10895	10897	10899	10905	10906	10907	10908

10911 10930 10940 10948 10956 10957 10961 10967 10970 10977 10978
10982 10987 10992 11001 11003 11007 11013 11020 11026 11038 11039
11041 11045 11046 11055 11056 11060 11061 11064 11065 11068 11077
11083 11100 11102 11108 11110 11126 11132 11140 11158 11161 11162
11165 11167 11168 11170 11183 11186 11196 11199 11205 11206 11211
11213 11223 11225 11229 11236 11237 11242 11257 11268 11270 11271
11273 11274 11275 11285 11286 11291 11292 11294 11304 11306 11320
11341 11342 11344 11351 11357 11363 11369 11378 11382 11383 11386
11388 11391 11404 11414 11434 11449 11451 11457 11462 11469 11470
11477 11478 11487 11489 11490 11492 11493 11499 11503 11504 11509
11512 11517 11518 11519 11520 11529 11530 11534 11537 11544 11546
11547 11571 11574 11577 11588 11592 11598 11605 11614 11619 11624
11639 11653 11655 11668 11682 11685 11729 11736 11738 11740 11742
11749 11752 11753 11758 11764 11765 11767 11768 11774 11778 11788
11790 11798 11799 11801 11803 11808 11810 11812 11819 11822 11823
11828 11837 11838 11841 11843 11848 11850 11864 11874 11885 11887
11891 11905 11908 11920 11921 11924 11933 11937 11941 11947 11955
11964 11968 11973 11981 12000 12006 12008 12009 12020 12024 12037
12040 12043 12049 12051 12058 12061 12067 12070 12071 12087 12141
12147 12157 12159 12162 12163 12169 12172 12174 12176 12181 12184
12187 12193 12200 12202 12204 12206 12210 12212 12214 12221 12222
12223 12227 12231 12234 12240 12265 12270 12279 12286 12291 12295
12302 12310 12311 12315 12317 12318 12333 12349 12353 12373 12375
12420 12422 12424 12426 12436 12437 12439 12440 12441 12442 12443
12446 12447 12449 12451 12461 12464 12465 12467 12468 12474 12475
12477 12485 12494 12496 12497 12509 12523 12535 12541 12549 12559
12566 12596 12604 12621 12638 12649 12677 12681 12684 12688 12689
12690 12691 12692 12701 12704 12712 12713 12717 12725 12726 12732
12733 12737 12738 12741 12744 12746 12748 12754 12762 12776 12784
12786 12790 12795 12799 12803 12809 12825 12828 12832 12837 12842
12845 12850 12851 12857 12858 12860 12868 12876 12882 12888 12891
12894 12968 12969 12970 12973 12974 12976 12977 12979 12988 12992
12994 13001 13004 13007 13010 13011 13014 13016 13018 13024 13027

13041 13043 13044 13045 13055 13071 13076 13077 13078 13084 13089
13090 13093 13102 13107 13134 13137 13157 13160 13170 13173 13209
13234 13235 13237 13241 13242 13247 13248 13252 13254 13264 13266
13267 13271 13274 13275 13280 13283 13287 13291 13295 13302 13306
13307 13317 13321 13333 13352 13356 13423 13426 13429 13430 13431
13432 13433 13436 13439 13441 13443 13448 13450 13453 13459 13461
13462 13471 13476 13483 13487 13496 13502 13507 13513 13524 13532
13609 13611 13612 13617 13621 13622 13624 13630 13632 13633 13638
13644 13647 13650 13658 13659 13662 13663 13665 13668 13678 13689
13693 13698 13705 13710 13721 13727 13730 13736 13747 13751 13755
13757 13762 13791 13842 13843 13851 13852 13854 13858 13859 13861
13862 13865 13866 13868 13872 13877 13879 13880 13882 13887 13894
13902 13905 13906 13908 13912 13915 13931 13933 13948 13957 13960
13968 13972 13997 13999 14001 14005 14009 14010 14011 14013 14015
14016 14025 14031 14039 14042 14053 14055 14073 14077 14084 14088
14092 14094 14097 14098 14107 14121 14123 14130 14131 14135 14142
14144 14150 14154 14156 14170 14175 14182 14184 14190 14193 14196
14202 14203 14213 14216 14217 14218 14219 14224 14231 14233 14242
14244 14298 14300 14301 14302 14307 14315 14318 14320 14325 14327
14328 14330 14332 14336 14338 14339 14346 14354 14355 14358 14359
14366 14381 14383 14390 14394 14398 14404 14407 14413 14420 14423
14440 14445 14449 14459 14463 14464 14466 14468 14471 14475 14487
14505 14510 14516 14517 14519 14551 14553 14557 14562 14565 14568
14569 14572 14577 14580 14581 14589 14598 14603 14614 14619 14621
14629 14644 14646 14653 14660 14662 14686 14689 14693 14695 14697
14700 14706 14711 14718 14723 14730 14732 14738 14748 14758 14764
14794 14795 14799 14801 14804 14807 14810 14812 14817 14834 14835
14838 14846 14860 14862 14871 14872 14877 14892 14895 14896 14897
14902 14909 14924 14925 14929 14932 14939 14940 14942 14955 14976
14985 15008 15009 15010 15012 15017 15019 15021 15027 15030 15032
15039 15047 15052 15059 15061 15064 15073

Příloha B – popis kódu programu Flow 123D



Obrázek 18: Okno programu Flow parser ihned po spuštění

Jediné aktivní tlačítko je „Open MTR“. Po kliknutí dojde ke spuštění funkce `openMTR_Click(object sender, EventArgs e)`, která otevře dialogové okno, které umožní uživateli zvolit vstupní soubor materiálů.

Zpracování souboru materiálů

Pokud byl zvolen soubor s příponou *.mtr, funkce dále zaktivní tlačítko „Stop process“ a vytvoří nové vlákno (thread), ve kterém dochází ke zpracování načteného souboru. Soubor je pomocí sady regulárních výrazů rozdělen na 7 částí (Materials, Storativity, Sorption, DualPorosity, SorptionFraction, Geometry, Density).

Příklad regulárního výrazu pro načtení části s materiály. Výraz načte vše (včetně značek) od `$Materials` až po `$EndMaterials`.

```
// Materials
Regex reg = new Regex(@"[\x24](Materials)(.*)[\x24](EndMaterials)",
RegexOptions.Singleline);
Match materials = reg.Match(data);
```

Řetězec `[\x24]` zastupuje znak dolaru (\$). Parametr `RegexOptions.Singleline` pak mění význam operátoru tečky v regulárním výrazu. Ten nyní zastupuje všechny znaky včetně zalomení konce řádky (`\n`). Obdobným způsobem jsou načteny i zbývající sekce.

Jednotlivé části jsou dále parsovány regulárními výrazy.

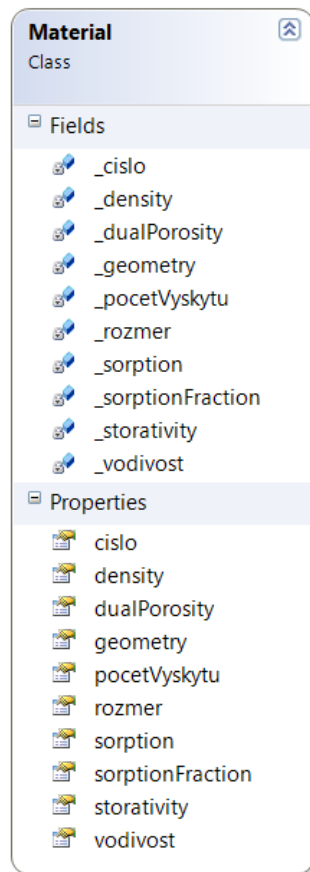
```
String result = materials.Value;
```

```
String pattern =  
"\n(?:<param1>\s+)(?:<param2>\d+)(?:<param3>\s+)(?:<param4>\d{2})(?:<pa  
ram5>\s+)(?:<param6>\d+(\.\d*)?)";  
Regex reg_replace = new Regex(pattern);  
MatchCollection matches = reg_replace.Matches(result);
```

Proměnná *matches* nyní obsahuje kolekci objektů typu *Match*. Každý objekt z této kolekce ale už představuje jeden rozparsovaný řádek. V případě parsování sekce *\$Materials* je to číslo materiálu, rozměr a jeho vodivost.

Celá kolekce je procházena v cyklu *foreach* a v ní jsou dodatečně parsovány již načtené zbylé části.

```
pocet = matches.Count;  
if (pocet > 0)  
{  
    foreach (Match match in matches)  
    {  
        // vynecháno -- kód pro kontrolu přerušení procesu  
  
        Material material = new Material();  
        material.cislo = int.Parse(match.Groups["param2"].Value);  
        material.rozmer = int.Parse(match.Groups["param4"].Value);  
        material.vodivost = double.Parse(match.Groups["param6"].Value);  
  
        // vynecháno -- kód pro parsování dalších částí  
  
        materials.Add(material);  
    }  
}
```



Obrázek 19: Diagram třídy Material

Pro uchování všech vlastností daných materiálů byla vytvořena třída. Diagram třídy je zobrazen na obrázku 19. Uchovávány jsou hodnoty: číslo, density, dual porosity, geometry, pocet výskytů, rozměr, sroption, sorption fraction, storativity, vodivost.

V jazyce C# je možné používat vlastnosti. Ty v praxi nahrazují stále opakující se schéma metod „getValue()” a “setValue()”. Stávají se jedinou možností jak komunikovat s privátními proměnnými.

Ukázka deklarace proměnné a vlastnosti

```

private int _cislo;
public int cislo {
    get
    {
        return _cislo;
    }
    set
    {
        _cislo = value;
    }
}
  
```

Objekty typu *Material* postupně naplňují kolekci *materialy*. Po úplném načtení a rozparsování souboru s materiály je vlákno ukončeno a jediné aktivní tlačítko je „Open MSH“.

Zpracování souboru sítě

Nyní uživatel musí zadat soubor sítě. Po kliknutí na tlačítko „Open MSH“ je spuštěna funkce `openMSH_Click(object sender, EventArgs e)`. Ta obdobně jako předchozí funkce `openMTR_Click`, zaktivní tlačítko „Stop process“ a vytvoří nové vlákno (thread), ve kterém dochází ke zpracování načteného souboru. Soubor je za použití regulárních výrazů rozdělen do tří částí (MeshFormat, Elements, Nodes).

Regulární výraz pro načtení části *Elements*.

```
Regex regMaterial = new Regex("[\x24](Elements)(.*)[\x24](EndElements)",
RegexOptions.Singleline);
Match material = regMaterial.Match(data);
```

Pokud se podařilo načíst část *Elements*, celá její část je uložena do proměnné *result* a dochází k procházení pole *materialy*, které obsahuje objekty všech materiálů získaných parsováním souboru s materiály (*.mtr).

V každém kroku cyklu je vytvořen regulární výraz a vytvořen objekt typu `Regex`, kterému je tento regulární výraz předán jako parametr.

Třída `Regex` má metodu `Replace`. Prvním argumentem je řetězec, ve kterém budou hledány výskyty odpovídající regulárnímu výrazu. Druhým argumentem může být delegát `MatchEvaluator`, tedy v podstatě funkce – ta vrací řetězec, kterým bude nahrazen výskyt odpovídající regulárnímu výrazu.

```
if (material.Success)
{
    String result = material.Value;

    for (int x = 0; x < materialy.Count; x++)
    {
        // vynecháno -- kód pro kontrolu přerušení procesu

        String pattern = "(?<param1>" + materialy[x].cislo +
            ")(?<param2>\\s+)(?<param3>" + materialy[x].cislo + ")";

        Regex reg_replace = new Regex(pattern);
        int pocet = reg_replace.Matches(result).Count;
        citac = 0;
        result = reg_replace.Replace(result, this.Regular);
        materialy[x].pocetVyskytu = citac;
        this.celkemVyskytu += citac;
        citac = 0;
    }
}
```

```

    }
    data = meshFormat.Value + "\n" + nodes.Value + "\n" + result;
}

```

Jako delegát byla předána funkce `Regular(Match m)`. Po zavolání metody `Regex.Replace` je tedy každý výraz vyhovující regulárnímu výrazu nahrazen návratovou hodnotou funkce `Regular`. Funkce ke každému výskytu daného materiálu přidává pořadové číslo. To je uchováváno ve statické proměnné `citac`. V jednom cyklu může tedy být tato funkce volána několikrát. Na konci každého cyklu je proměnná `citac` nulována.

```

public static int citac = 0;

public string Regular(Match m)
{
    citac++;
    return m.Groups["param1"].Value + citac.ToString("0000") +
m.Groups["param2"].Value + m.Groups["param3"].Value + citac.ToString("0000");
}

```

Použití delegátu výrazně urychluje běh programu. Při použití konstrukce typu níže uvedené, je pak rozdíl ve zpracování souborů `mm.mtr` a `mm.msh` necelých 18 minut.

```

String result = material.Value;

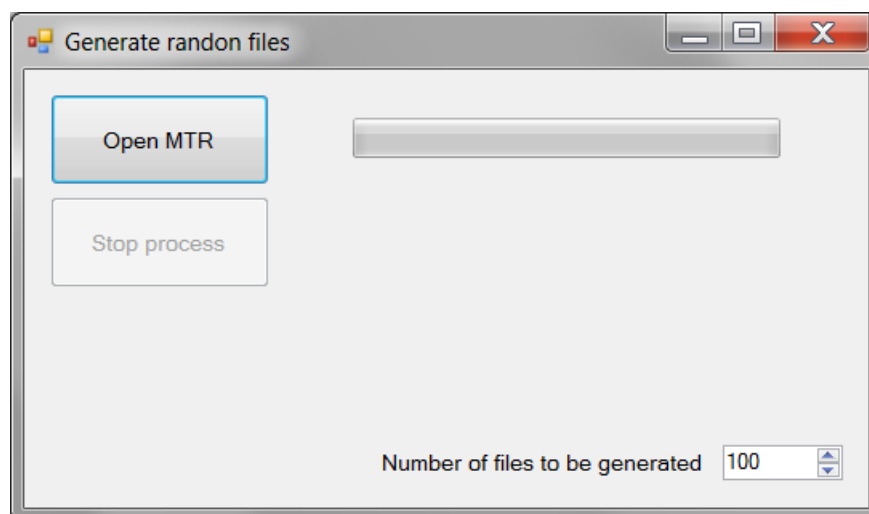
for (int x = 0; x < cisla.Count; x++)
{
    String pattern = "(" + cisla[x] + ")(\\s+)( " + cisla[x] + ")";

    Regex reg_replace = new Regex(pattern);
    int pocet = reg_replace.Matches(result).Count;
    int cislo = 1;
    String replacement = "";

    for (int i = 0; i <= pocet; i++)
    {
        replacement = "${1}" + cislo.ToString("0000") + "${2}${3}" +
cislo.ToString("0000");
        result = reg_replace.Replace(result, replacement, 1, i);
        cislo++;
    }
}

```


Příloha C – popis kódu programu Generate Random files



Obrázek 20: Okno programu Generate random files

Po počátečním spuštění je aktivní pouze tlačítko „Open MTR“. Událost kliknutí obsluhuje funkce `openMTR_Click(object sender, EventArgs e)`. Ta otevře dialogové okno pro zvolení datového souboru sítě.

Zpracování souboru sítě

Při zvolení datového souboru sítě s příponou (*.mtr) funkce zaktivní tlačítko „Stop process“, které umožňuje přerušit nově vytvořené vlákno (thread), ve kterém dochází ke zpracování načteného souboru.

V dolním pravém rohu může být zvoleno, kolik vstupních souborů s definicí sítě má být vygenerováno.

Datový soubor sítě je rozparsován na několik částí. Následuje regulární výraz pro načtení části \$Materials – \$EndMaterials, která obsahuje definici materiálů.

```
// Materials
reg = new Regex(@"[\x24](Materials)(.*)[\x24](EndMaterials)",
RegexOptions.Singleline);
Match materials = reg.Match(data);
```

Načtení této sekce probíhá po řádcích díky parametru `RegexOptions.Singleline`. Každý řádek této sekce představuje jeden materiál. Program následně parsuje jednotlivé řádky regulárním výrazem a hydraulické vodivosti nahrazuje hodnotou vodivosti vynásobenou o náhodné číslo z gaussovského rozdělení.

Samotné nahrazování má na starost funkce *Replace* objektu *Regex*, která jako parametr přijímá řetězec, ve kterém má k nahrazení dojít a delegát *MatchEvaluator* - funkci, která vrací řetězec, kterým bude nahrazen řetězec odpovídající masce následujícího uvedeného regulárního výrazu.

```
String result = materials.Value;
String pattern =
"(<param1>\\s+)(?<param2>\\d+)(?<param3>\\s+)(?<param4>\\d{2})(?<param5>\\s+
)(?<param6>\\d+(\\.\\d*)?)";

Regex reg_replace = new Regex(pattern, RegexOptions.Singleline);
MatchCollection matches = reg_replace.Matches(result);
```

K volání funkce *Replace* dochází v cyklu. Jeho počet provedení odpovídá počtu zvolených souborů sítí k vygenerování. V této smyčce dochází ke spojení všech načtených částí souborů a následnému uložení.

```
for (int i = 0; i < int.Parse(this.numericUpDown.Value.ToString()); i++)
{
    String materialsChanged = result;

    // vynecháno -- kód pro kontrolu přerušení procesu

    materialsChanged = reg_replace.Replace(materialsChanged,
    this.Regular);

    // vynecháno -- kód pro uložení souboru
}
```

Funkce *RandomNumber()* implementuje Box-Mullerovu transformaci následovně

```
static private double RandomNumber()
{
    double x1 = random.NextDouble();
    double x2 = random.NextDouble();
    double y1 = Math.Sqrt(-2*Math.Log(x1))*Math.Cos(2*Math.PI*x2);
    //double y2 = Math.Sqrt(-2*Math.Log(x1))*Math.Sin(2*Math.PI*x2);

    //transformation to the log-normal distribution
    double z1 = Math.Pow(10, (y1/1.645));

    return z1;
}
```

Příloha D - kód pro vytvoření distribuční funkce v matlabu

```
data = csvread('SortedFile204.csv');
data = csvread('SortedFile215.csv');
data = csvread('SortedFile228.csv');

data = csvread('SortedFile228.csv');

scnsize = get(0,'ScreenSize');
f = figure('Name','Distribucni funkce','NumberTitle','off',
'Position',[100, scnsize(4)-600, 800, 500],
'PaperPositionMode','auto');
hold on
grid on
Y = data(:,1)';
X = data(:,2)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'red', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,3)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'blue', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,4)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'green', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,5)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'black', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,6)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'yellow', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,7)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'magenta', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,8)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', 'cyan', 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,9)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', [1,0.4,0.6], 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
```

```

X = data(:,10)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', [0.4,1,0.6], 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,11)';
p = plot(X, Y);
set(p, 'Color', [1,0.6,0.4], 'LineWidth', 3)

Y = data(:,1)';
X = data(:,12)';
p = plot(X, Y);
axis([0 max(X)+0.1*max(X) 0.5 1])
set(p, 'Color', [0.4,0.6,0.9], 'LineWidth', 3)

Q50 = quantile(X, .50);
Q75 = quantile(X, .75);
Q95 = quantile(X, .95);

set(gca, 'xscale', 'log')

xlabel('Mira koncentrace [ppm]', 'FontSize', 10, 'FontWeight',
'b');
ylabel('Pravdepodobnost [1]', 'FontSize', 10, 'FontWeight', 'b');
title('Distribucni funkce', 'FontSize', 10, 'FontWeight', 'b');
leg = legend('0 let', '5 000 let', '10 000 let', '15 000 let',
'20 000 let', '25 000 let', '30 000 let', '35 000 let', '40 000
let', '45 000 let', '50 000 let');
lp=get(leg, 'Location');
set(leg, 'Location', 'East')

hold off

```